ماهنامه علمى پژوهشى

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

مدلسازی میکرومکانیکی رفتار تغییرشکل در مقیاس میکروساختار فولاد ضدزنگ 316L بر یایه مدل مدل میکروساختاری با استفاده از روش اجزاء محدود کریستال یلاستیسیته

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، كديستى jaami-a@um.ac.ir ،9177948974

چکیدہ	طلاعات مقاله
ماهیت ناهمسان گرد دانههای موجود در بافت فلزات کریستالی سبب به وجود آمدن ناساز گاری بین دانهها در هنگام تغییرشکل میشود. این پدیده	ىقالە پژوھشى كامل
با کوچکتر شدن مقیاس تا حد میکرو و مزو، تشدید میشود. ناهمگنی موجود در تغییرشکل در مقیاس میکرو را با قوانین بنیادی تئوری پیوسته	دريافت: 20 مهر 1393
بالاستيسيته نمي توان مورد بررسي قرار داد. در اين مطالعه رفتار تغييرشكل لغزشي فولاد ضدزنگ أستنيتي 316L در مقياس هاي ياد شده با	ﺪَﻳﺮ <i>ﺵ</i> : 06 ﺁﺫﺭ 1393
استفاده اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته مدلسازی شده است. فرمول بندی مدل ماده با استفاده از زیربرنامه UMAT به نرم افزار آباکوس	رائه در سایت: 03 دی 1393
معرفي شده است. اعتبار سنحي با استفاده از مقايسه نتايج جل به روش كريستال پلاستيسته حاصل از آباكوس با نتايج تحليلي حاصل زم افزار	ئليد واژگان:
متلب، انجام شده است. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق خوب نتایج عددی و تحلیلی میباشد. در بخش دوم مدل سازی آزمون کشش روی نمونه	وش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بربامه UMAT
فولاد ضدزنگ حاوی یک دانه به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسته انجام شده است و با نتایج تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج	.یر.ر بیکرومکانیک
نشان میدهد که رفتار تغییرشکل و موضعی شدن تککریستال با روش پیشنهاد شده قابل پیش بینی بوده در حالیکه روش اجزاء محدود	بولاد ضدزنگ L316
ماکرومکانیک از شناسایی این رفتارها ناتوان میباشد. در بخش پایانی، مدل پلیکریستال میکروساختار با تعداد 10 دانه تولید شد. با تعریف جهات	النهبندى ورونوى
کریستالی متفاوت برای مدل میکروساختار تولید شده، تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته روی آن صورت گرفت. نتایج حاکی از	
غیریکنواخت بودن تغییرشکل در مقیاس دانهبندی است. همچنین با تغییر جهات کریستالی نمودار تنش-کرنش ماده در بخش پلاستیک	
رفتارهای متفاوتی را نشان میدهد.	

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

Bahram Bandeshah, Abdolrahman Jaamialahmadi*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University Of Mashhad, Mashhad, Iran * P.O.B. 9177948974 Mashhad, Iran, jaami-a@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

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

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

ABSTRACT

Grains in polycrystalline texture have anisotropic deformation nature. This cause material to show completely different behavior at meso and micro scale than they do at macro scale. To be specific, deformation at these scales is heterogeneous and cannot be modeled using constitutive equation in continuum plasticity. In this paper, in order to investigate deformation behavior of 316L stainless steel at micro scale a crystal plasticity finite element (CPFE) modeling system has been developed. The crystal plasticity equations were implemented in the ABAQUS/Implicit FE code through a user-defined material subroutine, UMAT. Verification was done through comparing the CPFE result against those obtained through implementing crystal plasticity formulation in MATLAB software. Comparison show good agreement between the analytical and CFFE 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.

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

1– مقدمه

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

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



مزو¹ رفتار بسیار متفاوتی از آنچه در مقیاس ماکرو دارند از خود نشان میدهند. در نتیجه تنشهای محلی، کرنشها، و دورانهای درون هر دانه بهصورت غیریکنواخت² و ناپیوسته خواهد بود. تنشها، کرنشها و دورانها نه تنها به جهت دانهها بستگی خواهند داشت بلکه از قیدها و محدودیتهایی که دانههای مجاور ایجاد می کنند، نیز تاثیر خواهند پذیرفت.

تئوری پلاستیسیته مورد استفاده در ماکرومکانیک با استفاده از مشاهدات تجربی در مقیاس ماکرو پی یزی شده است که به پدیدههای تغییرشکل در فلزات با یک دید محیط پیوسته نگاه می کند. این تئوری که با عنوان پلاستیسیته پدیداری³ نیز شناخته میشود، مکانیزمهایی که باعث ایجاد تغییرشکل پلاستیک میشوند را در نظر نمی گیرد و تغییرشکل را بصورت یکنواخت فرض می کند. در حالی که تغییرشکل در فلزات ناشی از نفزش در روی صفحاتی خاص و در جهاتی خاص می باشد که این باعث غیریکنواختی تغییرشکل در مقیاس میکروساختار میشود. به همین دلیل این تئوری در پیش بینی تغییرشکل در مقیاس میکروساختار و همچنین مطالعه تاثیرات مشخصات دانه ها و بافت فلز بر روی روند تغییرشکل ناتوان است. بنا رویکرد فیزیکی تغییرشکل در فلزات کریستال پلاسیتسیته⁴ که با یک رویکرد فیزیکی تغییرشکل در فلزات کریستالی را مورد مطالعه قرار می دهد،

با مدلسازی قوانین فیزیکی حاکم در مقیاس مزو یا همان مقیاس دانه، استخراج خواص مواد در مقیاس ماکرو امکان پذیر خواهد بود. این زمینه از مطالعات بین رشته ای مهندسی مواد و مکانیک که سعی در بررسی روش های مناسب برای مدلسازی مواد در مقیاس های متفاوت و ارتباط این مقیاس ها با یکدیگر دارد، با عنوان مدلسازی چند مقیاسی مواد⁵ شناخته میشود. مثلا واماندگی در مقیاس ماکرو اغلب دلالت براین دارد که نواحی مشخصی از ماده در مقیاس میکرو دچار واماندگی شدهاند. به علاوه، ثابت شده که مشخصات مرزدانه ها در توضیح و کنترل پلاستیسیته مواد در دمای بالا، ابرپلاستیسیتی مواد⁶ و شکنندگی⁷ نقش بسزایی دارند[1]. اساسا درک بهتر از اینکه چه ریزساختاری آسیپ پذیرتر می باشد، ما را به تولید موادی بهتر از اینکه چه شامل تولید دیگروساختار با رفتار الاستیک-پلاستک مطلوب در مقیاس ماکرو و به رموری در مقیاس ماکرو قادر خواهد ساخت که مثال هایی از آن می تواند

هدف زمینه مطالعاتی مدلسازی چند مقیاسی، توسعه امکانی برای انجام مطالعه بر روی میکروساختارهای متفاوت بدون نیاز به انجام عملیات هزینه بر آزمایشگاهی نظیر سیکلهای عملیات حرارتی برای بهدست آوردن میکروساختار مورد نظر، میباشد. برای مثال جهت مطالعه تاثیر بافت بر روی شکلپذیری 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. مدلسازی چند مقیاسی بخش اعظمی از نیاز به این نوع عملیات آزمایشگاهی برای تولید میکروساختارها را از روی دوش محققان بر میدارد. مثلا با داشتن یک المان حجمی نماینده⁹

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

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 سادهای را تولید نمودند. در پژوهش یاد شده، اندازه همه دانهها 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 دانهها ارائه دهد.

از دیگر مطالعات انجام شده در این زمینه می توان به مقاله رضایی بزاز و همکاران [6] در سال 2012 اشاره کرد. آنها در مقاله خود با استفاده از تصویر برداری ¹⁰SEM، میکروساختار دوبعدی فولاد دوفازی فریت- مارتنزیت را تولید کردند و با تعریف مدل ماده وس¹¹ در نرمافزار آباکوس و وارد کردن مدل هندسی میکروساختار به دست آمده از SEM به نرمافزار اباکوس، منحنی تنش-كرنش و الگوى شكست فولاد دوفازى را شبيهسازى كردند. اين تحقيق بدلیل عدم استفاه از تئوری کریستال پلاستیسیته قابلیت شناسایی پدیدههای حاصل از لغزش کریستالی و همچنین تاثیرات بافت را دارا نمی باشد. در مطالعه [7] در سال 2005 آلياژی مجازی از آهن و مس با هدف تعيين تنش بین گرهها در فازهای مختلف شبیه سازی شد. در این تحقیق هر دانه به 48 جزء¹² 10 گرهای تقسیم شده بود و دانهها دارای اشکال ابتدائی بودند. در سال 2013 یال¹³ [8] مطالعهای میکرومکانیکی بر روی میکروساختار فولاد دوفاری DP590 با هدف مشاهده رفتار تغییرشکل، موضعی شدن کرنش پلاستیک و ناپایداری پلاستیک انجام داد. در تحقیق یاد شده موضعی شدن کرنش به خاطر تغییرشکل های 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. گنزالس [9] در سال 2012 در رساله دکتری خود تغییرشکل پلی کریستالها و تنشهای پسماند در آنها 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 مدلسازی آماری رشد ترک در زمینه میکروساختاری در آلیاژ Ti-6Al-4V مورد مطالعه قرار دادند. آنها با استفاده از الگوریتم دانهبندی ورونوی¹⁵مدل دوبعدى ميكروساختار را توليد نمودند و مسئله را تحت شرايط كرنش سطحي حل نمودند. عدم استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و در نظر گرفتن مدل دو بعدی برای میکروساختار موجب محدودیت نتایج حاصل از تحقیق یاد شده خواهد شد.

فولادهای ضدزنگ باتوجه به خواص خوبی که دارند داری کاربردهای زیادی در صنعت میباشند. با توجه به کاربردهای فولاد ضدزنگ آستنیتی¹⁶ گرید 316L در محصولاتی با ابعاد کوچک مانند میکرولولهها، تجهیزات

¹⁻ Meso(10-5m) 2- Heterogeneous

³⁻ Phenomenological plasticity

⁴⁻ Crystal plasticity 5- Multi-scale material modeling

 ⁵⁻ Multi-scale material r
 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

σ(α)

 $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a} \operatorname{sgn}(\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau})$

$$\dot{\boldsymbol{g}}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \boldsymbol{h}_{\alpha\beta} \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\beta)} \quad \beta = 1, 2, \dots 12 \to (FCC)$$
(3)

$$\dot{\sigma}_{ij} = \mathcal{C}_{ijkl} \left(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^{P} \right) = \mathcal{C}_{ijkl} \left(\dot{\varepsilon}_{kl} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mu_{ij}^{(\alpha)} \right)$$
(4)

تانسور مرتبه دوم اشمید است که بصورت رابطه (5) تعریف می شود: $\mu^{(lpha)}_{ii}$

$$\mu_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (\mathbf{s}_k^{(\alpha)} \, \mathbf{m}_j^{(\alpha)} + \mathbf{s}_j^{(\alpha)} \, \mathbf{m}_k^{(\alpha)}) \tag{5}$$

در این روابط α نمایانگر سیستم لغزشی میباشد که توسط ${oldsymbol{s}}^{(lpha)}$ و

ش مشخص می شود. تعداد سیستم های لغزشی به نوع ساختار شبکه **ش**^(a) کریستالی بستگی دارد. برای مثال ساختار کریستالی FCC دارای چهار صفحه لغزشی مستقل، <111>، میباشد که در هر کدام سه جهت لغزش مستقل، {110}، وجود دارد که مجموعا 12 سیستم لغزشی را تشکیل خواهند داد (α = **1,2,...1**2). در ابتدای تغییرشکل در همهی سیستمهای لغزشی میباشد و جهت لغزش $S^{(\alpha)}$ و نرمال بر صفحه لغزش $m^{(\alpha)}$ برای $au^{\alpha} = \mathbf{0}$ همهی جزءهای درون یک دانه خاص یکسان است. هنگامی که تغییرشکل پلاستیک رخ میدهد 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 12سیستم لغزش باشند. *C_{ijkl} ت*انسور مرتبه چهار سفتی میباشد و اندیسهای *ijkl* مقادیر بین 1 تا 3 را به خود می گیرند. در حالت اولیه (t=0) . مى باشند. $\varepsilon_{kl} = \mathbf{0} , g^{\alpha} = g_0 , \gamma^{\alpha} = \mathbf{0} , \dot{\sigma}_{ii} = \mathbf{0}$

کرنش سختی مواد ماده مورد مطالعه با استفاده از مقاومت سیستم لغزشی نسبت به لغزش، g^{lpha} ، تعریف می شود. در شبکه کریستالی دو نوع سخت شوندگی تعریف می شود، اول خودسخت شوندگی $^{12}_{klphalpha}$ و دوم سخت شوندگی نهان h_{ab}^{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 تجمی نیز در قالب رابطه (7) معرفی می شود.

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

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_{0}^{t} \left| \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right| dt \tag{7}$$

در این روابط h_0 مدول سخت شوندگی اولیه، au_0 استحکام برشی اولیه، تنش شروع تغییرشکل پلاستیک بزرگ و q فاکتور سختشوندگی $au_{
m s}$ می باشد. در مدل سخت شوندگی همسانگرد تیلور، مدول سخت شوندگی نهان و خودسختشوندگی، یکسان در نظر گرفته می شوند. بنابراین مقدار q برای مدول سختشوندگی همسانگرد برابر یک در نظر گرفته میشود. برای جلوگیری از اثرات وابستگی به نرخ (ویسکوپلاستیک) بر روی همگرایی تحلیل، باید مقدار نسبتا بالایی برای n در نظر گرفته شود که در اینجا مقدار 55 در نظر گرفته شده است.

پزشکی، استنتها ی¹ کرونری **[11]،** سرن آنژیوگرافی، مطالعه میکرومکانیکی بر روی برخوردار خواهد بود. این امر کمک خواه میکروساختاری نظیر جهات کریستالی دانهها بر روی عملکرد محصولات یاد شده در مقیاس کاری، مورد بررسی قرار گیرد.

در این مقاله جهت بررسی رفتار تغییرشکل فولاد ضدزنگ آستنیتی 316L در مقیاس میکرو از روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته² استفاده شده است. ابتدا روابط موجود در کریستال پلاستیسیته اجمالا از نظر گذرانده خواهند شد. در بخش بعد برای انجام سنجش قابلیت استناد نتایج، روابط تحلیلی موجود در نرمافزار متلب در قالب برنامهای پیادهسازی شده و مسئله تغییرشکل 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 پلاستیسته است. در گام بعدی با هدف اثبات عدم توانایی روش اجزاء محدود ماکرومکانیک در شناسایی و پیشبینی رفتار تغییرشکل در مقیاس میکروساختار و همچنین بررسی رفتار نازکشدگی³ تککریستال، شبیهسازی آزمون کشش روی مدلی با یک دانه به روش اجزاء محدود كريستال پلاستيسيته انجام مىشود و نتايج حاصل با نتايج بدست آمده از روش اجزاء محدود ماكرومكانيك (پيوسته) 4 مقايسه می شوند. در نهایت برای بررسی تاثیر جهات کریستالی بر روی رفتار تغییرشکل فولاد ضدزنگ یاد شده، شبیهسازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بر روی المان حجمی نماینده⁵ با تعداد 10 دانه که با استفاده از روش ورونوی بصورت سهبعدی تولید شده، انجام گرفته است.

2- معادلات ساختاری کریستال پلاستیسیته

تئوری کریستال پلاستیسیته برای نمایش جریان نابجاییها در راستای سیستمهای لغزشی در فلزات کریستالی برحسب تنش برشی مولفه شده⁶ استفاده می شود. در این تئوری فرض بر این است که تغییر شکل پلاستیک متشکل از مجموعهای از لغزشهای کریستالی درکل سیستمهای لغزشی فعال مىباشد [2]. اشميد [12] دريافت كه لغزش پلاستيك زماني اتفاق مىافتد كه تنش برشی مولفه شده روی صفحهای کریستالوگرافی موسوم به صفحه لغزش γ^{lpha} و در جهت لغزش به یک حد بحرانی رسیده باشد. از همین رو نرخ لغزش در هر سیستم لغزشی α به تنش برشی τ^{lpha} که بر روی سیستم لغزشی مذکور عمل مى كند، مرتبط مىشود. در اين مقاله از مطالعات تيلور⁷ [13] هيل⁸ و رایس⁹ [14]، آسارو¹⁰ [15] پیروی شده که در زمینه تئوری کریستال پلاستیسیته پیش قدم می باشند. گزیده ای از معادلات بنیادی رفتار پلاستیک وابسته به نرخ (ویسکویلاستیک)¹¹ کریستال در روابط (1) تا (4) آورده شدەاند.

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma_{ij} \mu^{(\alpha)}_{ij} \tag{1}$$

1- Stent

¹²⁻ Self-hardening 13- Latent hardening

¹⁴⁻ Taylor cumulative shear strain

^{2.-} Crystal plasticity finite element method(CPFEM) 3. Necking 4. Macro-mechanic(continuum) finite element

⁵⁻ Representative volume element 6.- Resolved shear stress

⁷⁻ Taylor

⁸⁻ Hill

⁹⁻ Rice 10- Asaro

¹¹⁻ Visco-plasticity

3 - خواص ماده

همان طور 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 ۲۰۱۵ و ۲۰۵ و ۲۰۵ برای معرفی خواص الاستیک ماده استفاده میشوند. خواص الاستیک از مرجع [17] استخراج شدند. آستنیت نسبت به دیگر فلزات دارای ساختار مکعبی مانند آلومینیوم، نیکل و فریت، ناهمسان گردی الاستیک بالایی دارد. آستنیت دارای سفتترین جهت در راستای جهت قطری <111 میباشد. در حالی که نرمترین جهت در راستای <100 قرار می گیرد (شکل 1).

خواص پلاستیک تک کریستال برای ماده مستقیما از طریق آزمایش تجربی بدست نمیآیند. روش استاندارد در تحقیقات برای کالیبره کردن پارامترهای مورد نیاز در قانون بنیادی¹ مدل ماده کریستال پلاستیسیته، انطباق تغییرشکل 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 پلاستیسته به همراه پس پردازش.

4-1-توليد ميكروساختار

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								
С ₁₁ GPa)	C12 (GPa)	C44 (GPa)	п	à	h_0	τ_s	$ au_0$	
04/6	137/7	126/2	55	0/001	675	175	90	

¹⁻ Constitutive law





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

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 می باشد. به نحوی که با استفاده از این توصیف یک تحلیل قابل استناد و معنی دار روی رفتار ماده بتوان انجام داد. در بین این روش های تقریبی استفاده از روش دانهبندی ورونوی³ بسیار مرسوم می باشد. دانهبندی ورونوی شامل تقسیم بندی یک ناحیه در فضا $D \in R^d$ به تعداد مشخصی ناحیه I_A که دارای مکانی تعیین بندی یک ناحیه در فضا تواحی بر یکی از نقاط دانهای P_i^4 که دارای مکانی تعیین شده هستند، منطبق می باشند. این نواحی مجموعهای از همهی نقاطی را تمکیل می دهند که به یک نقطهی دانه ای خاص (با به مفهوم آشناتر نقطه توانه ای) نزدیک تر از بقیه نقاط جوانه ای می باشند[19]. به عبارتی نرم ارائه شده در رابطه (8) این که هر نقطه به چه دانه ای تعلق دارد را، تعیین می کند.

 $\boldsymbol{R}_{j} = \left\{ \underline{X} \in \boldsymbol{D} : \left\| \underline{\boldsymbol{P}}_{j} - \underline{X} \right\| < \left\| \underline{\boldsymbol{P}}_{j} - \underline{X} \right\| \forall \boldsymbol{i} \neq \boldsymbol{j}, \right\} \quad \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j} = 1, 2, \dots, \boldsymbol{n}$ (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 tessellation4- Seed point

^{.}

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

- دانهها همزمان در نقاط جوانهزنی شروع به جوانهزنی می کنند.
 - دانهها در همه یجهات و با یک نرخ یکسان رشد می کنند.
 - مرزدانهها در جایی است که دانهها به هم میرسند.

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

برای بکارگیری الگوریتم ورونوی از نرمافزار متن باز¹ نپر² [20] برای تولید میکروساختار استفاده شده است. از نقاط قوت این نرمافزار این است که دارای بخش جداگانه برای مشزنی میکروساختار تولید شده میباشد که از کتابخانه الحاقی جیمش³ بهره میبرد. این نرمافزار تنها قابل اجرا شدن روی سیستمهای متن باز میباشد و فاقد رابط گرافیکی کاربر⁴ است. دستورات مربوط به تولید میکروساختار مورد نظر در این نرمافزار باید از طریق ترمینال اجرای دستورات در محیط لینوکس به نرمافزار وارد شوند. برای مثال دو دستور زیر برای تولید میکروساختار ارائه شده در شکل 4 بکار میرود.

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







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

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

دستور اول فایلی با فرمت tess که خروجی ماژول دانهبندی⁵ است، ایجاد می کند. این فایل حاوی موقعیت فضایی دانهها 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 دانهبندی 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 جهات 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 میشود. سپس مراحل پیش پردازش از قبیل اضافه کردن شرایط مرزی، اعمال بار و غیره روی مدل و تعریف مشخصات جهات کریستالوگرافی دانهها قبل از انجام تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته، انجام می گیرد.

جهات کریستالوگرافی به صورت اتفاقی در قالب زوایای اولر⁶ که معمول ترین روش برای بیان جهات کریستالوگرافی می اشند تولید شد. این زوایا از طریق معرفی سه عدد ۲٫۱ م و ۲۵ در بازه صفر تا یک در رابطه (9)، بدست آمدند[21].

	$\varphi_1 =$	$360 n_1$	
	$\varphi =$	$a\cos(2n_2-1)$	
1	$\varphi_2 =$	360 <i>n</i> ₃	(9)

بعد از اینکه زوایای اولر برحسب توزیع عنوان شده محاسبه شدند، به جهت دارا بودن قابلیت بکارگیری در روابط کریستال پلاستیسیته، باید تبدیل به قالب شاخصهای میلر⁷ [uwl] (hkl)، در بیان جهات کریستالی شوند. این تیدیلات با استفاده از راباط (10) تا (15) انجام می گدند[21].

	•	
$h = n\sin\varphi\sin\varphi_2$		(10
$k = n\sin\varphi\cos\varphi_2$		(11
$l = n \cos \phi$		(12
$u = n'(\cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\varphi)$		(13

5- Tessellation

¹⁻ Open source

²⁻ Neper

³⁻ z-mesh4- Graphical user interface

⁶⁻ Euler angles 7- Miller indices

$v = n'(-\cos\varphi_1\sin\varphi_2 - \sin\varphi_1\cos\varphi_2\cos\varphi)$	(14)
$v = n' \sin \varphi \sin \varphi_1$	(15)

در این روابط **n** و '**n** ضرایب صحیح می اشند که برای بدست آوردن اعداد صحیح در روابط ضرب می شوند. جهات کریستالوگرافی اختصاص یافته به دانهها در قالب شاخصهای میلر در جدول 2 آورده شده اند.

4-3-تحليل اجزاء محدود كريستال پلاستيسيته

از آنجا که مدل ماده یکریستال پلاستیسیته در نرم افزار اباکوس تعریف نشده این مدل ماده باید در قالب کد زیر برنامه UMAT¹ که از قابلیتهای نرم افزار آباکوس برای تعریف مدل مواد جدید می باشد، بکار گرفته شود. این کد قابلیت انجام تحلیلهای تغییرشکلهای کوچک، تغییرشکلهای بزرگ با کارگیری تئوری کرنش محدود² و چرخش محدود³ را دارا می باشد. این کد امکان انجام تحلیلهای تنش کریستالها را در نرم افزار آباکوس را فراهم می کند. 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 وبررسی 5-1- اعتبارسنجی مدل مورد استفاده

جهت اعتبارسنجی مدل روابط سینماتیک تغییر شکل کریستال ها که در منابع [22] موجود می باشند در قالب کدی در نرمافزار متلب به کار گرفته شد. در این کد می توان برای دو ساختار مکعبی FCC و BCC در ماده ای 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 شود. با وارد کردن اطلاعات ذکر شده به کد متلب می توان 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. تغییرشکل یک تککریستال مکعبی در حالتی که تنشی در راستای جهت<100> به آن اعمال میشود با استفاده از این کد حل شد. از طرفی همین تغییر شکل نیز با استفاده از زیربرنامه UMAT در آباکوس مورد تحلیل كريستال پلاستيسيته قرار گرفت. ادامه نتايج مربوط به مقدار تنش برشي مولفه شده $au_{
m rss}$ حاصل از مدل اجزاء محدود كريستال پلاستيسيته با نتايج حاصل از برنامه متلب مقایسه می شوند. نتیجه مقایسه حاکی از تطابق خوب نتايج تحليل و نتايج اجزاء محدود است كه صحت روند اجزاء محدود استفاده شده را تاييد مي كند (جدول 3).

5-2-شبیهسازی سهبعدی آزمون کشش تککریستال

در این بخش آزمون کشش تک محوره به عنوان یکی از پایهای ترین آزمونها جهت شناسایی خواص مواد، به روش اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته (CPFEM) بر روی یک مدل تک کریستال شبیه سازی می شود. شکل مدل مورد استفاده به صورت استوانه با قطر و طول به ترتیب 1 و 4 میلی متر می باشند. شرایط مرزی به گونه ای می باشند که مدل از یک انتها در تمام جهات ثابت شده است و از هر گونه چرخش آن ممانعت به عمل آمده است. و

شاخصهای میلر	الوگرافی دانهها در قالب	جدول 2 جهات كريستا
(hkl)	[<i>uvw</i>]	دانه / شاخص میلر
(021)	 [412]	1
(111)	[314]	2
(01 3)	[131]	3
(013)	[531]	4
(211)	[011]	5
(110)	[111]	6
(313)	233	7
(11 1)	211	8
(411)	[122]	9
(162)	[201]	10

خطای	حل اجزاء- $ au_{rss}$	حل- $ au_{rss}$	α-سيستم
مطلق	محدود (MPa)	تحلیلی(MPa)	لغزشى
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). جهت گیری اولیه کریستال در قالب شاخصهای میلر به صورت [200](214) می باشد که در بیان زوایای اولر معادل (*3.20, *1115, *1/10) قرار می گیرد. مدول یانگ فولاد ضدزنگ ما15 برابر 200 = 3 و ضریب پواسون برابر با 0.3 v = 0.3می باشد. در این بخش هدف این است تا با استفاده از تحلیل (CPFEM) رفتار می باشد. در این بخش هدف این است تا با استفاده از تحلیل (CPFEM) رفتار تک کریستال فولاد ضد زنگ ما16 در ناحیه گلویی شدن مورد مطالعه قرار تگیرد 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 می برد، در پیش بینی رفتار ماده در میکرومکانیک، نتایج مدل سازی به روش اجزاء محدود ماکرومکانیک با نتایج ماصل از CPFEM مقایسه شده است.

صفحات لغزش یک ساختار پلهای را در حین تغییر شکل ایجاد می کنند (شکل 6). هر پله نمایانگر نوارهای لغزشی می باشد که در حالت ماکرو این نوارها و خطوط لغزش مفهومی آشنا دارند. لبه جزءها دارای جهتی مشابه با جهت خطوط لغزش می باشند. هنگامی که صفحات کریستالی در حین آزمون کشش روی هم می لغزند، منجر به بوجود آمدن جابجایی نسبی نیمه ی بالایی

¹⁻ User defined material subroutine 2- Finite strain

³⁻ Finite rotation

le l'olation

⁴⁻ Euler angles

مهندسی مکانیک مدرس، اردیبهشت 1394، دوره 15، شماره 2

نمونه نسبت به نیمه یایینی 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 ماکرومکانیک مدل شده است، اثری از چرخش و تحول شبکه و حالت پلهای شدن در اثر چرخش، که همان نقش بافت در حین تغییر شکل را ایفا می کند، مشاهده نمی شود. اما مشاهده می شود که در شکل 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 تغییرشکل تک کریستال این است که رفتار موضعی شدن تغییرشکل در تک کریستال هم از آنچه در حالت ماکرو اتفاق میافتد، متفاوت است. در حالتی که مدل سازی 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 می باشد. این پدیده در شکل 8 به نمایش گذاشته شده است. دلیل بیضوی شدن سطح مقطع در منطقه موضعی شدن تغییرشکل، چرخش شبکه و محدودیت تغییرشکل کریستالها در امتداد



شکل 5 مدل استفاده شده برای شبیه سازی آزمون کشش



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

صفحات لغزش ميباشد.

تفاوت مشهود دیگر در رفتار تغییرشکل تک کریستال و مدل کلاسیک در منحنی بار- ازدیاد طول آنها میباشد. بار مورد نیار برای تغییرشکل در مدل کلاسیک (ماده همگن)، بیشتر از بار مورد نیاز یک تک کریستال 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 9 نمایانگر منحنی بار -ازدیاد 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 تغییرشکل مواد کریستالی است که بر این واقعیت که مواد ریزدانه (ماده با تعداد دانههای

بیشتر) در دمای پایین استحکام بالاتری دارند صحه میگذارند [24]. در شکل 10 مقایسه بین منحنیهای تنش-کرنش حاصل از دو مدل فوقالذکر با منحنی تجربی انجام شده است. همان طور که پیشبینی میشد، منحنیهای حاصل از آزمون تجربی و روش اجزاء محدود ماکرومکانیک بر یکدیگر منطبق هستند. ولی منحنی بدست آمده از شبیه سازی آزمون کشش میباشد که بار مورد نیاز برای تغییر شکل تک کریستال به مراتب کمتر از بار میباشد که بار مورد نیاز برای تغییر شکل تک کریستال به مراتب کمتر از بار دانه ها نواحی مرزدانه ای افزایش پیدا می کنند و نواحی مرزدانه ای بیشتر یعنی ایجاد موانع بیشتر در سر راه حرکت نابجاییهایی که با حرکت خود تغییر شکل پلاستیک را بوجود میآورند. وجه اهمیت این نتیجه از آن جهت است که قادر بوده ایم این نتیجه را بدون انجام آزمون تجربی کشش روی یک تک کریستال، و صرفا با روش اجزاء محدود رائه 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 دانهها بر روی رفتار تغییر شکل ماده، تحلیل اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته بر روی یک مدل پلی کریستالی انجام شده است. این مدل متشکل از ده دانه فولاد ضدزنگ ما15 می باشد. بارگذاری و شرایط مرزی روی RVE مطابق شکل 11 تنظیم شده اند. جابجایی گرههای قرار گرفته در سطح بالایی مدل میکروساختار در راستای y برابر با 0.00 میلی متر می باشد. در مقابل، گرههای قرار گرفته روی سطح کف مدل در راستای x مقید شده اند. بعلاوه، گرههای روی لبههای سطح کف مدل، در راستای x و z مقید شده اند (شکل 11).

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

¹⁻ Elemet Set

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 تغییرشکل ناهمسان گرد و غیریکنواخت میباشد. در حالت ماکرو وقتی تعداد دانههای فلز خیلی زیاد است، این رفتار ناهمسان گرد 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 کاملا وابسته به رفتار تکتک دانهها شود. بنابراین وابستگی به جهت در رفتار ماده نمایانگر میشود. در این حالت رفتار تغییرشکل ماده کاملا 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

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، TRSS، بزرگتری روی صفحات لغزشی خود میباشند، تغییرشکل 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 تغییرشکل پلاستیک اتفاق نیفتد. همین امر سبب بوجود آمدن تغییرشکل 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 مالت 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.







شکل پیداست که به ازای هر گروه از جهات کریستالی ماده پاسخ تنش-کرنش متفاوتی از خود نشان میدهد. در واقع تاثیر پارامتر میکروساختاری جهات کریستالوگرافی بر روی رفتار در مقیاس ماکرو کاملا مشهود است. همان طور که از شکل پیداست در قسمت الاستیک پاسخ هر پنج مدل یکسان است. این مسئله از آنجا که فرض میشود تنش الاستیک تنها از قسمت الاستیک گرادیان تغییرشکل تاثیر می پذیرد، قابل پیش بینی بود[2].

6- نتيجه گيرى

در این مقاله رفتار تغییر شکل فولاد ضد زنگ 316L در مقیاس میکرو و مزو مدلسازی شد. ابتدا اعتبارسنجی مدل مورد استفاده از طریق برنامه نویسی و رابط تحلیلی در متلب انجام شد. سپس با ارائه دو نوع مدلسازی به روش کریستال پلاستیسیته و روش اجزاء محدود ماکرومکانیک که از روابط پلاستیسته کلاسیک سود میبرد، اثبات شد که روش اجزاء محدود ماکرومکانیک ابزار توانمندی در مدلسازی رفتار ماده در مقیاسهای 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 تغییرشکل و الگوهای توزیع تنش و کرنش در میکروساختار را دارا می باشد. این توانایی ها در بسیاری از تحلیلهای میکرومکانیک حائز اهمیت فراوان میباشند. در ادامه یک مدل دانهبندی میکروساختار با تعداد 10 دانه ایجاد شد. برای این مدل جهات کریستالی متفاوتی تخصیص داده شد و تاثیرات جهات کریستالی بر روی رفتار ماده گزارش شد. مشخص شد که با تغییر جهات، در نمودار تنش-کرنش ماده پراکندگی ایجاد میشود. نتایج این بخش حاکی از اهمیت تاثیر بافت و وضعیت کریستالوگرافی دانهها بر روی پاسخ ماده در حالت ماکرو می-باشد. به نحوى كه ميتوان با انجام طراحي حساس به ميكروساختار بهترين کارایی را از ماده در مقیاس ماکرو بدست آورد. همچنین با مطالعه نمودارهای تراز تغییر شکل حاصل از شبیه سازی اجزاء محدود کریستال پلاستیسیته مشخص است که تغییرشکل در مقیاس مزو کاملا غیریکنواخت و وابسته به

جهت می،اشد. در مقیاس ماکرو وابستگی به جهت در رفتار تنش -کرنش ماده به ناهمسان گردی تعبیر میشود. پس نتیجه گرفته میشود که هر دانه، تغییرشکل کاملا ناهمسان گرد دارد. این ناهمسان گردی به همراه کنش بین دانههای مختلف در بافت فلز منشا رفتار غیریکنواخت فلز در تغییرشکل در مقیاس مزو می،اشد.

7- تقدير و تشكر

در پایان مولفین وظیفه خود میدانند تا از دکتر رومین کوئی² عضو بخش تحقیقات مواد موسسه ایکول فرانسه که از راهنماییها و مشورتهای ایشان در طول انجام این تحقیق جهت ایجاد مدل هندسی میکروساختار و جهات کریستالی بهرهمند شدهاند، تشکر نمایند.

8-مراجع

- 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, *Mcechanics 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 austeniticferritic stainless steel, *Mechanics of Materials*, Vol. 42, No. 4, pp. 395-403, 2010.
- [5] M. Jafari, M. Talaei, 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 Yeilding *Materials Sci. andEng*, 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, Ph.D. 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 nite element method: Generation, meshing and remeshing, *Computer*

2- Romain quey

- 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 Sup'erieure des Mines de Saint-'Etienne, France, pp. 2008. [22] B. L. Adams, S. R. Kalidindi, D. T. Fullwood, *Microstructure Sensitive*