



# Multiscale Modeling Of Cyclic Plastic Deformation of Magnesium Alloy AZ31 Using Crystal Plasticity Finite Element Method and Computational Homogenization

## ARTICLE INFO

### Article Type

Original Research

### Authors

Jalili M.<sup>1</sup> PhD,  
Soltani B.\*<sup>1</sup> PhD,  
Nayebi A.<sup>2</sup> PhD

### How to cite this article

Jalili M, Soltani B, Nayebi A. Multiscale Modeling Of Cyclic Plastic Deformation of Magnesium Alloy AZ31 Using Crystal Plasticity Finite Element Method and Computational Homogenization. Modares Mechanical Engineering. 2020;20(3):761-775.

<sup>1</sup>Mechanical Engineering Faculty, University of Kashan, Kashan, Iran  
<sup>2</sup>Mechanical Engineering Faculty, Shiraz University, Shiraz, Iran

### \*Correspondence

Address: University of Kashan, Ghotb Ravandi Boulerad, Kashan, Iran  
Phone: +98 (31) 55913426  
Fax: +98 (31) 55511121  
bsoltani@kashanu.ac.ir

### Article History

Received: December 31, 2018  
Accepted: November 15, 2019  
ePublished: March 01, 2020

## ABSTRACT

In the present research, a multiscale method based on crystal plasticity finite element method and computational homogenization is proposed to simulate monotonic and cyclic plastic deformation of a highly textured rolled magnesium alloy AZ31. All active deformation mechanisms including slip, twinning as well as detwinning have been simulated in the model through user material subroutine in ABAQUS (UMAT). All representative volume elements have been constructed, synthetically. Polycrystal laminate has been reproduced by representative volume element (RVE) and periodic boundary conditions have been applied on the RVE faces. For cyclic validations, uniaxial compression-tension along extrusion direction has been applied for 2 loading cycles and the problem at the macroscopic scale has been solved by the ABAQUS finite element solver. The results are in good accordance with the experimental curves and the proposed model can accurately predict all cyclic behavior characteristics like asymmetry in a stress-strain curve due to alternating twinning-detwinning, tensile and compressive peak stresses, twinning and detwinning.

**Keywords** Finite Element Crystal Plasticity; Computational Homogenization; Twinning; Detwinning; AZ31 Mg Alloy

## CITATION LINKS

[1] Global climate change: Vital signs of the ... [2] Washington: United States Environmental ... [3] Learn the facts: Weight affects fuel ... [4] Cost-effectiveness of alternative powertrains ... [5] Fuel consumption and CO2 emissions from ... [6] Plastic Strain in ... [7] Plastic anisotropy and the role of non-basal slip in ... [8] Simulation of the rolling and shear texture ... [9] Incorporation of deformation twinning in crystal ... [10] Crystallographic texture evolution in ... [11] An analysis of nonuniform and localized ... [12] Material rate dependence and localized ... [13] Micromechanics of crystals and ... [14] A constitutive model for hcp materials deforming by ... [15] Yielding of magnesium: From single crystal to ... [16] Crystal plasticity analysis of texture development ... [17] Continuum modeling of the response of an mg ... [18] An inverse optimization strategy to determine single crystal ... [19] Elasto-Viscoplastic constitutive equations for ... [20] Computational homogenization of ... [21] A review of predictive nonlinear theories for ... [22] Crystal-Plasticity finite-element analysis of inelastic ... [23] Crystal plasticity finite-element simulation of work-hardening behavior ... [24] Effect of twinning and detwinning on inelastic ... [25] Effect of pre-strain on work-hardening ... [26] Deformation behavior upon two-step ... [27] Anisotropic deformation behavior under various strain paths in ... [28] Crystal plasticity finite element analysis ... [29] Role of twinning on the stress and strain behaviors during ... [30] A crystal plasticity model for hexagonal ... [31] Overview no. 42 texture development and strain ... [32] Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline ... [33] Phenomenological crystal plasticity ... [34] A Crystal plasticity modeling considering volume ... [35] Direct observation of twinning-detwinning-retwinning ... [36] Microstructure-Sensitive investigation of ... [37] Multiaxial fatigue of extruded AZ31B magnesium ... [38] Nonlinear Finite Elements for Continua and ... [39] H5ebds: An archival data format for electron back-scatter diffraction ... [40] The role of dislocations in strain hardening ... [41] The Role of twinning deformation on the ... [42] Influence of loading direction on the ... [43] Role of {10-12} twinning characteristics in the deformation ... [44] Fatigue of extruded AZ31B magnesium alloy ... [45] Cyclic deformation ANF fatigue of extruded ... [46] Multiaxial cyclic behavior and fatigue ... [47] Microstructure damage evaluation associated ... [48] Fatigue damage development in extruded ... [49] Microstructure-Sensitive computational ... [50] Fatigue crack nucleation: Mechanistic modelling ... [51] Recent developments in assessing microstructure-sensitive ... [52] Multi-Scale Mechanisms of Twinning-Detwinning in Magnesium ...

## تحلیل چندمقیاسی تغییر شکل سیکلی آلیاژ نورد گرم شده منیزیم AZ31 با بهره‌گیری از تئوری‌های کریستال پلاستیسیته اجزای محدود و همگن‌سازی محاسباتی

محمد جلیلی PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

بهزاد سلطانی PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

علی نایی PhD

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

### چکیده

در این پژوهش مدلی چندمقیاسی برای شبیه‌سازی رفتارهای سیکلی آلیاژ نورد گرم شده منیزیم AZ31 ارائه می‌شود. مدل ارائه شده قادر است لغزش، توپینینگ و بازگشت توپینینگ را به‌درستی شبیه‌سازی نماید. ساختار نظری پژوهش از ترکیب دو تئوری کریستال پلاستیسیته اجزای محدود و همگن‌سازی محاسباتی تشکیل شده است. کلیه معادلات کریستال پلاستیسیته در قالب سابروتین مادی UMAT پیاده‌سازی شده‌اند. ورق پلی‌کریستال ماده از طریق تولید المان حجمی معرف (RVE) بازتولید شده است و شرایط مرزی پرپودیک روی وجوه آن اعمال شده است. شبیه‌سازی‌های سیکلی در دو سیکل به‌ازای بارگذاری فشاری-کششی در راستای جهت نورد اعمال شده و مساله در مقیاس میکروسکوپی توسط حلگر اجزای محدود آباکوس حل شده است. نتایج در تطابق بسیار خوب با منحنی‌های تجربی است و مدل ارائه شده قادر است، مشخصه‌های منحنی‌های تجربی مانند عدم تقارن در کشش و فشار، مقادیر تنش بیشینه کششی و فشاری، توپینینگ و بازگشت توپینینگ را به‌درستی شبیه‌سازی نماید.

**کلیدواژه‌ها:** کریستال پلاستیسیته اجزای محدود، همگن‌سازی محاسباتی، توپینینگ، بازگشت توپینینگ، آلیاژ AZ31

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۰/۱۰

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۴/۲۸

نویسنده مسئول: bsoltani@kashanu.ac.ir

### ۱- مقدمه

انتشار گازهای گلخانه‌ای مانند دی‌اکسیدکربن به جو زمین باعث محبوس شدن حرارت تولیدشده ناشی از سوخت‌های فسیلی شده و یکی از عوامل موثر بر گرمایش جهانی است [1,2]. صنایع حمل و نقل اعم از زمینی و هوایی به‌عنوان یکی از عمده‌ترین عوامل انتشار گازهای گلخانه‌ای به‌تنهایی در حدود یک‌سوم گازهای گلخانه‌ای را تولید می‌کنند. کاهش وزن وسایل حمل و نقل، اصلی‌ترین راهکار دستیابی به هدف کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای است. در صورتی که جرم وسایل نقلیه ۵ الی ۱۰٪ کاهش داده شود، مصرف سوخت در حدود ۱/۳ تا ۱/۶٪ کاهش خواهد یافت و از اینجا نقش بااهمیت فلزات و مواد سبک در این فرآیند کاملاً آشکار می‌شود [3-5]. در سال‌های اخیر، تحقیقات نظری و تجربی بسیاری به‌منظور ارزیابی امکان جایگزینی فلزات رایج در صنعت حمل و نقل مانند آلومینیوم

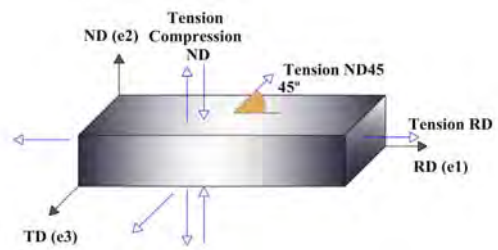
و فولاد با آلیاژهای کارشده منیزیم انجام شده است و هم‌اکنون نیز این تحقیقات ادامه دارد. فلز منیزیم ۳۶٪ از آلومینیوم، ۷۴٪ از روی و ۷۹٪ از فولاد سبک‌تر است. همچنین این فلز از نظر فراوانی هشتمین عنصر در پوسته زمین است. یکی از چالش‌های مهم در این مسیر، کم‌بودن فرم‌پذیری آلیاژهای منیزیم در دمای اتاق است و به همین دلیل هم‌اکنون، اغلب فرآیندهای فرم‌دهی آلیاژهای منیزیم در دمای بالا (بیش از ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد) انجام می‌شود. کاستی دیگر آلیاژهای منیزیم ناهمسانگردی پلاستیک حین تغییر شکل و پس از آن است.

بر مبنای معیار تیلور [6]، یک ماده برای آنکه بتواند به‌طور همگن در تمامی جهات تغییر شکل یابد، نیاز به فعال شدن حداقل پنج مکانیزم تغییر شکل است. سه مد لغزشی قاعده‌ای (Basal)، منشوری (Prismatic) و هرمی مرتبه اول (First order Pyramidal) فقط امکان تغییر شکل در راستای  $a$  را فراهم می‌آورند (شکل ۱). به بیان دیگر، سه مد لغزش باسال، منشوری و هرمی مرتبه اول، چهار سیستم لغزشی مستقل از هم را به‌دست می‌دهند. بنابراین برای آنکه امکان تغییر شکل در صفحه‌ای غیر از صفحه قاعده (باسال) فراهم شود، باید سیستم لغزشی در راستای  $a + c$  نیز به‌عنوان پنجمین سیستم لغزشی و تکمیل‌کننده معیار تیلور فعال شود. تنها در این صورت است که شرایط برای تغییر شکل همگن و آزادانه فلز فراهم خواهد شد. از سوی دیگر نسبت تنش بحرانی تجزیه‌شده سیستم هرمی مرتبه دوم به تنش بحرانی تجزیه‌شده روی صفحه باسال در دمای اتاق در حدود ۱۰۰ است [7]. این بدین معنی است که برای فعال شدن سیستم هرمی نوع دوم، در دمای اتاق باید تنش بسیار زیادی به آلیاژ اعمال شود و بنابراین امکان واماندگی ماده در اثر این تنش زیاد وجود خواهد داشت. در این شرایط، مکانیزم تغییر شکل توپینینگ (Twinning) جایگزین سیستم تغییر شکل هرمی مرتبه دوم خواهد شد و نقش پنجمین سیستم تغییر شکل مستقل را در منیزیم و آلیاژهای آن ایفا خواهد نمود. مقدار تنش بحرانی تجزیه‌شده (CRSS) توپینینگ در دمای اتاق حدود ۲ مگاپاسکال است و بنابراین عامل تغییر شکل در راستای غیر از راستای  $a$  مانند راستای  $a + c$  در دمای اتاق مکانیزم تغییر شکل توپینینگ است. علاوه بر لغزش و توپینینگ، یکی دیگر از مدهای تغییر شکل بسیار مهم در منیزیم و آلیاژهای کارشده آن بازگشت توپینینگ (Detwinning) است. این پدیده به‌خصوص در بارگذاری‌های القاکننده تغییر مسیر کرنش مانند بارگذاری‌های سیکلی، نقش بسیار مهمی را ایفا می‌کند و عامل عدم تقارن منحنی تنش-کرنش و حلقه‌های هیستریزس (Hysteresis) و همچنین تغییر جهت شبکه کریستالی است. در اثر رخداد بازگشت توپینینگ، شبکه کریستالی به حالت قبل از توپینینگ شدن بازمی‌گردد. از نظر فیزیکی مرزهای لایه‌های توپین شده در جهت معکوس حرکت می‌کنند و در نتیجه آن، کسر حجمی توپین شده به ماتریس برگشت داده می‌شود.

که توسط پیرس و همکاران [11, 12] و آسارو [13] پایه‌ریزی شده است، استفاده شد [22]. به منظور مدل‌سازی سخت‌شوندگی از مدل گراف و همکاران [15] استفاده شده است. ویژگی دیگر مدل *هاما* و همکاران، امکان مدل‌سازی بازگشت توپینینگ در چارچوب تئوری کریستال پلاستیسیته است. آنها فرض کردند که در صورتی که علامت تنش برشی تجزیه‌شده روی صفحه توپینینگ از مثبت به منفی تبدیل شود، مرزهای لایه‌های توپین شده می‌توانند در خلاف جهت حرکت کنند و این منتج به کاهش کسر حجمی توپینینگ خواهد شد. از این نظر، مدل *هاما*، یک نقطه عطف در موضوع شبیه‌سازی رفتارهای سیکلی آلیاژهای منیزیم محسوب می‌شود؛ زیرا تا پیش از این مکانیزم بازگشت توپینینگ به طور صریح در معادلات کریستال پلاستیسیته دیده نشده بود. این مدل پس از آن با موفقیت برای مدل‌سازی رفتار آلیاژهای منیزیم و تیتانیوم به‌ازای بارگذاری‌های دومحوری و دومرحله‌ای به‌کار گرفته شده است [23-29].

از بررسی پیشینه‌های ارائه‌شده در این بخش، می‌توان دریافت که در اکثر مدل‌های ارائه‌شده و پژوهش‌های انجام‌شده روی آلیاژهای منیزیم فقط رفتارهای تک‌محوری مورد ارزیابی قرار گرفته است و در مقام مقایسه تعداد مدل‌های ارائه‌شده و بررسی‌های انجام‌شده با موضوع شبیه‌سازی رفتارهای سیکلی این مواد بسیار محدودتر است. به‌طور دقیق‌تر تاکنون دو مدل نظام‌مند به‌منظور ارزیابی رفتارهای سیکلی آلیاژهای منیزیم ارائه شده است. مدل اول، مدل خودسازگار وانگ است که به مدل EVPSC-TDT موسوم است [30]. این مدل نمی‌تواند تمامی منحنی‌های تجربی را به‌درستی شبیه‌سازی کند. مشکل دیگر این مدل به ماهیت تئوری‌های خودسازگار برمی‌گردد و آن ناتوانی در بازتولید توزیع فضایی تنش و کرنش در درون پلی‌کریستال و مناطق با اهمیت مانند مرز دانه‌ها و درون دانه‌ها است. مدل دوم، مدل *هاما* [22] است. در این مدل نیز تمهیداتی برای مدل‌سازی بازگشت توپینینگ گذارده شده است. نظر به استفاده از چارچوب تئوری کریستال پلاستیسیته اجزای محدود، این مدل نقایص مدل‌های خودسازگار مانند مدل وانگ را ندارد و می‌تواند برای شبیه‌سازی پدیده‌های چون خستگی، آسیب و دیگر پدیده‌های متأثر از توزیع فضایی و موضعی تنش و کرنش به‌کار برده شود. یکی از کاستی‌های تحلیل *هاما*، گسسته‌سازی هر دانه با فقط یک المان اجزای محدود است و این موضوع باعث شده که این مدل در تحلیل‌هایی که گرادین میدان تنش و کرنش اهمیت داشته باشد، کارایی شایسته را نداشته باشد. از جمله این تحلیل‌ها می‌توان به بررسی خستگی، آسیب، باند برشی (Shear Band) و رفتارهای سیکلی اشاره کرد. مدل *هاما* تاکنون برای تحلیل سیکلی آلیاژهای منیزیم اعمال نشده است و در شبیه‌سازی‌های انجام‌شده تأکید بر شبیه‌سازی فرآیند بارگذاری- باربرداری بوده است.

هدف این پژوهش، ارائه و صحت‌سنجی یک مدل اجزای محدود بر پایه تئوری کریستال پلاستیسیته و تئوری همگن‌سازی محاسباتی برای مدل‌سازی رفتارهای تک‌محوری و سیکلی آلیاژ نورد گرم شده منیزیم AZ31 است. مکانیزم‌های لغزش، توپینینگ و بازگشت



شکل ۱) نمای شماتیک ورق نوردشده همراه راستاهای نورد (RD)، عرضی (TD) و عمود بر صفحه ورق (ND)

کالایدیندی با بهره‌گیری از مفهوم شبه‌لغزش برای توپینینگ که توسط ون‌هوت [8] معرفی شد، برای اولین بار توپینینگ را در معادلات متشکل از تئوری کریستال پلاستیسیته اجزای محدود وارد نمود. در این مدل مکانیزم توپینینگ در مقیاس تک‌کریستال به‌طور صریح وارد شده است [9]. وی فرض نمود که تغییر شکل پلاستیک در نتیجه برش ناشی از لغزش و توپینینگ روی می‌دهد و به‌منظور احتساب اثر توپینینگ، ترمی به تانسور نرخ تغییر شکل پلاستیک اضافه نمود. رویکرد نوین معرفی‌شده در این پژوهش، مدل‌سازی توپینینگ در قالب یک فرآیند شبیه‌لغزش است. ویژگی برجسته این مدل، حفظ ساختار کلاسیک تئوری کریستال پلاستیسیته به روش اجزای محدود است. الگوی انتگرال‌گیری از معادلات کریستال پلاستیسیته در حضور توپینینگ از پژوهش پیشین همین نویسندگان الگوبرداری شده است [10]. پیرس و همکاران [11, 12] و آسارو [13]، چارچوب تئوری کریستال پلاستیسیته را پایه‌ریزی کردند. در اکثر پژوهش‌های انجام‌شده بر منیزیم و آلیاژهای آن، فقط رفتارهای تک‌محوری مدل شده است که از آن میان می‌توان به مدل‌های *استاروسلسکی* و *آناند* [14]، *گراف* و همکاران [15] و *مایاما* و همکاران [16]، *فرناندز* و همکاران [17] و *هرراسولاز* و همکاران [18] کرد. از میان مدل‌های ارائه‌شده فقط در مدل *هرراسولاز* و همکاران از ترکیب تئوری‌های کریستال پلاستیسیته اجزای محدود و همگن‌سازی محاسباتی برای ارزیابی رفتارهای تک‌محوری آلیاژ نورد گرم‌شده AZ31 استفاده شده است. آنها رفتار آلیاژ AZ31 نورد گرم‌شده را با بهره‌گیری از مدل کالایدیندی [9] بررسی کردند. به‌منظور مدل‌سازی سخت‌شوندگی از الگوی کوتاری و *آناند* [19] استفاده شده است. همچنین به‌منظور استخراج رفتار موثر پلی‌کریستال از روش همگن‌سازی محاسباتی استفاده شده است. تئوری همگن‌سازی محاسباتی یکی از تئوری‌های پیشرفته همگن‌سازی است. در این تئوری، کلیه محدودیت‌های تئوری‌های همگن‌سازی میدان میانگین مانند تئوری تیلور، ساچس و خودسازگار برطرف شده است [20, 21]. یکی از مراحل اثرگذار در این تئوری، چگونگی مدل‌سازی المان حجمی معرف (RVE) است به نحوی که رفتار آن تا حد امکان به رفتار پلی‌کریستال واقعی نزدیک باشد.

*هاما* و همکاران، نحوه باربرداری الاستیک در یک آلیاژ اکستروژده منیزیم را از طریق تئوری کریستال پلاستیسیته اجزای محدود بررسی کردند. در این تحقیق از تئوری وابسته به نرخ کریستال پلاستیسیته

رابطه نهایی تانسور گرادیان سرعت پلاستیک روی یک سیستم لغزش در پیکربندی میانی به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\dot{F}^p \alpha F^{p\alpha-1} = \dot{\gamma}^p \alpha s_0^\alpha \otimes n_0^\alpha \quad (5)$$

و در صورتی که رابطه (5) روی تمامی سیستم‌های لغزشی دارای پتانسیل لغزش تعمیم داده شود، تانسور گرادیان سرعت پلاستیک در پیکربندی‌های میانی و جاری به شکل زیر قابل بازنویسی است:

$$\bar{L}^p = \sum_{\beta=1}^n \dot{F}^{p\beta} F^{p\beta-1} = \sum_{\beta=1}^n s_0^\beta \otimes n_0^\beta \dot{\gamma}^{p\beta} \quad (6)$$

$$l^p = \sum_{\beta=1}^n s^\beta \otimes n^\beta \dot{\gamma}^{p\beta} \quad (7)$$

$n$  برابر تعداد سیستم‌های لغزش است و  $s_0$  و  $n_0$  به ترتیب بردارهای لغزش و نرمال بر صفحه لغزش در پیکربندی میانی هستند. همچنین مقدار تنش برشی تجزیه شده روی هر صفحه لغزش عبارت است از:

$$\tau^\alpha = s^\alpha \cdot \tau n^\alpha = p^\alpha : T \quad (8)$$

چنانکه در رابطه بالا مشاهده می‌شود، مقدار تنش برشی تجزیه شده (حس شده) روی هر سیستم لغزش وابسته به مقدار تنش ماکروسکوپی و همچنین تانسور اشمید (Schmid) آن سیستم است. تانسور اشمید از حاصل ضرب خارجی بردارهای جهت لغزش و عمود بر آن به دست می‌آید.

پیرس و همکاران، در دو مقاله مروری بسیار مهم [11, 12] جنبه‌های مختلف تئوری را برای تک کریستال مورد بررسی قرار دادند و از این رابطه برای شبیه‌سازی موضعی‌شدگی استفاده کردند. آسارو و نیلمن [31] و آسارو [13] تئوری را برای مواد پلی کریستال توسعه دادند. هاجینسون [32]، رابطه توانی (9) را برای مرتبط کردن نرخ برش و تنش برشی تجزیه شده، پیشنهاد نمود. بر این مبنا رابطه بین نرخ برش و تنش برشی تجزیه شده از قرار زیر است:

$$\dot{\gamma}^i = \dot{\gamma}_0^i \left( \frac{\tau^i}{\tau_y^i} \right)^{\frac{1}{m}} \quad (9)$$

$\dot{\gamma}_0^i$  نرخ برش مرجع،  $\tau^i$  تنش برشی تجزیه شده روی سیستم لغزشی  $i$ ،  $\tau_y^i$  مقدار مقاومت سیستم لغزشی و  $m$  پارامتر حساسیت به نرخ ماده است.

## ۲-۲- نحوه مدل‌سازی توپینینگ کششی

در این مقاله از الگوی پیشنهاد شده کالیدیندی [9] برای مدل‌سازی توپینینگ در چارچوب تئوری کریستال پلاستیسیته استفاده شده است. این مدل در پژوهش‌های بسیاری با موفقیت به کار گرفته شده است. اکثر این پژوهش‌ها روی ساختارهای هگزگونال (Hexagonal) انجام شده‌اند [18, 33]. شایان ذکر است که مدل‌های دیگری نیز برای مدل‌سازی توپینینگ در ساختار کریستال پلاستیسیته نیز پیشنهاد شده‌اند [34]. همگی مدل‌ها از لحاظ مفهومی مشابه با مدل کالیدیندی هستند. کالیدیندی پیشنهاد نمود که توپینینگ به شکل یک فرآیند شبه لغزش در معادلات متشکله کریستال پلاستیسیته اجزای محدود وارد شود. بر این مبنا، لازم است تانسور گرادیان سرعت پلاستیک متناسب با حضور توپینینگ به عنوان مکانیزم تغییر شکل دوم اصلاح شود. روابط سینماتیکی مساله همانند قبل است، بدین معنی که تجزیه ضربی تانسور گرادیان تغییر شکل همچنان برقرار است. تانسور گرادیان سرعت

توپینینگ در ساختار تئوریک مدل، در نظر گرفته شده است. برخلاف مدل *hama* که فقط یک سیکل بارگذاری معکوس را شبیه‌سازی کرده است مدل ارائه شده در این تحقیق قادر است منحنی تنش- کرنش سیکلی را به طور کامل شبیه‌سازی نماید و از این طریق می‌توان تمامی مشخصه‌های منحنی تنش- کرنش سیکلی را ارزیابی نمود. مزیت دیگر مدل ارائه شده در مقایسه با مدل *hama* به کارگیری تئوری همگن‌سازی محاسباتی است. با به کارگیری این تئوری هر دو شرط تعادل و سازگاری در تمامی نقاط مادی ارضاء می‌شوند و بنابراین رفتار ماده کاملاً منطبق بر رفتار واقعی است. در مدل *hama* از روش تیلور برای ارتباط دو مقیاس تک کریستال و پلی کریستال استفاده شده است و بنابراین فقط شرط سازگاری بین دانه‌ها برقرار است و شرط تعادل ارضاء نمی‌شود. طبق آخرین دانش نویسندگان مدلی با این ویژگی‌ها در مورد آلیاژهای منیزیم تاکنون ارائه نشده است.

## ۲-۲- اصول تئوری

### ۲-۱- اصول کلی تئوری کریستال پلاستیسیته اجزای محدود

بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته، تغییر شکل جسم به وسیله تانسور گرادیان تغییر شکل (F)، توصیف می‌شود. این تانسور دربردارنده اطلاعات مربوط به تغییر شکل و چرخش یک المان مادی است. بر مبنای رویکرد تجزیه ضربی، تانسور گرادیان تغییر شکل به شکل حاصل ضرب دو تانسور گرادیان تغییر شکل الاستیک و گرادیان تغییر شکل پلاستیک بیان می‌شود.

$$F = F^e F^p \quad (1)$$

در رابطه ۱،  $F^e$  تانسور گرادیان تغییر شکل الاستیک و  $F^p$  تانسور گرادیان تغییر شکل پلاستیک است. در نتیجه لغزش صفحات کریستالی، جهت فضایی شبکه کریستالی تغییری نخواهد کرد و تغییر جهت فضایی شبکه کریستالی پس از انجام تغییر شکل پلاستیک به وسیله تانسور گرادیان تغییر شکل الاستیک در مدل‌سازی وارد خواهد شد. تانسور گرادیان سرعت پلاستیک در پیکربندی جاری عبارت است از:

$$l = l^e + l^p \quad (2)$$

در جایی که:

$$l = \frac{\partial v}{\partial x} \quad (3)$$

$$l^e = \dot{F}^e F^{e-1}, l^p = F^e \bar{L}^p F^{e-1}$$

$$\bar{L}^p = \dot{F}^p F^{p-1}$$

در روابط (۲) و (۳)،  $l$ ،  $l^e$  و  $l^p$  به ترتیب تانسورهای گرادیان سرعت، گرادیان سرعت الاستیک و گرادیان سرعت پلاستیک هستند. این سه تانسور در پیکربندی جاری تعریف می‌شوند. تانسور  $\bar{L}^p$  نیز تانسور گرادیان سرعت پلاستیک است که در پیکربندی میانی تعریف می‌شود. پیکربندی میانی مستقل از چرخش جسم صلب است و در اصطلاح پیکربندی ایزوکلینیک (Isoclinic) نامیده می‌شود. مقدار نرخ برش در هر صفحه کریستالی، خود به نرخ برش الاستیک و نرخ برش پلاستیک تقسیم‌بندی می‌شود:

$$\dot{\gamma}^i = \dot{\gamma}^{ei} + \dot{\gamma}^{pi} \quad (4)$$

پلاستیک در پیکربندی میانی به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} F &= F^e F^p \\ L &= \dot{F} F^{-1} \\ &= \dot{F}^e F^{e-1} + F^e \dot{F}^p F^{p-1} F^{e-1} \\ L^p &= \dot{F}^p F^{p-1} \end{aligned} \quad (10)$$

به‌منظور احتساب اثر برش ناشی از توپینینگ و همچنین لغزش مجدد در بخش توپین شده تانسور گرادیان سرعت پلاستیک به شکل زیر بازنویسی می‌شود:

$$L^p = L_{sl}^p + L_{tw}^p + L_{re-sl}^p \quad (11)$$

ترم اول سمت راست رابطه (۱۱)، توصیف‌کننده تانسور گرادیان سرعت پلاستیک ناشی از لغزش، ترم دوم تانسور گرادیان سرعت پلاستیک ناشی از توپینینگ و ترم آخر تانسور گرادیان سرعت پلاستیک ناشی از لغزش درون ناحیه توپین شده است. در این رویکرد، فرض می‌شود که کسر حجمی متناظر با یک سیستم توپینینگ  $\alpha$  با  $f^\alpha$  و کسر حجمی ناحیه توپین نشده با  $(1 - f^\alpha)$  است. از آنجا که توپینینگ باعث تغییر جهت بخشی از کریستال یا نقطه مادی می‌شود، مقدار کسر حجمی متناظر با لغزش، متناسب با کسر حجمی توپین شده کاهش می‌یابد؛ بنابراین روابط تانسور گرادیان سرعت لغزش در رابطه (۱۱) بر حسب نرخ برش به فرم زیر است:

$$\dot{\gamma}^i = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{\tau^i}{\tau_y^i} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^i) \quad (12)$$

$$L_{sl}^p = (1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha) \sum_{i=1}^{N_{sl}} \dot{\gamma}^i s_{sl}^i \otimes n_{sl}^i \quad (13)$$

در رابطه (۱۳)،  $\sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha$  مقدار کسر حجمی توپین شده ناشی از تمامی گزینه‌های توپینینگ است. چنانکه در ابتدای این بخش اشاره شد، توپینینگ همانند یک مکانیزم شبه‌لغزش در نظر گرفته شده است؛ بنابراین برای محاسبه نرخ برش روی صفحه توپینینگ نیز از یک رابطه توانی مشابه با رابطه (۱۲) استفاده می‌شود. در این صورت خواهیم داشت:

$$f^\alpha = \dot{f}_0 \left( \frac{|\tau^\alpha|}{\tau_y^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \rightarrow \tau = \begin{cases} \tau & \text{if } \tau \geq 0 \\ 0 & \text{if } \tau < 0 \end{cases} \quad (14)$$

$$L_{tw}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha \gamma_{tw} s_{tw}^\alpha \otimes n_{tw}^\alpha \quad (15)$$

توپینینگ کششی، تنها زمانی فعال خواهد شد که مقدار تنش برشی تجزیه شده روی صفحه توپینینگ بزرگ‌تر از صفر باشد.  $\dot{f}_0$  یک پارامتر مادی است. مقدار این پارامتر وابسته به نرخ بارگذاری (نرخ کرنش) است. در این مقاله مقدار این پارامتر برابر با ۱ قرار داده شده است. در رابطه (۱۵) فرض شد که:

$$\dot{\gamma}^{tw} = f^\alpha \gamma_{tw} \quad (16)$$

$$f^\alpha = \frac{df^\alpha}{dt} \quad (17)$$

$\gamma_{tw}$  مشخصه یک سیستم توپینینگ است. برای توپینینگ کششی در منیزیم این پارامتر برابر ۰/۱۲ است [33]. لازم به یادآوری است که توپینینگ کششی یک سیستم قطبی است و تنها زمانی فعال می‌شود که بارگذاری وارده به کریستال، باعث کشش محور عمودی می‌شود. آن  $(c)$  تانسور گرادیان سرعت پلاستیک متناظر با لغزش در ناحیه توپین شده نیز عبارت است از:

$$L_{re-sl}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha \left( \sum_{i=1}^{N_{sl-tw}} \dot{\gamma}^i s_{sl}^i \otimes n_{sl}^i \right) \quad (18)$$

$N_{sl-tw}$  تعداد سیستم‌های لغزشی فعال در ناحیه توپین شده است.

### ۳-۲- نحوه مدل‌سازی بازگشت توپینینگ کششی

وقوع بازگشت توپینینگ در مراجع تجربی متعددی تایید شده است [35]. در این مقاله به‌منظور مدل‌سازی بازگشت توپینینگ از رویکردی همانند توپینینگ استفاده شده است. یکی از فرضیه‌های انجام شده در این مطالعه آن است که مکانیزم‌های توپینینگ و بازگشت توپینینگ نمی‌توانند به‌طور همزمان با یکدیگر فعالیت داشته باشند. این فرض منطبق بر واقعیت فیزیکی است و در مراجع مختلف نیز درستی آن به روش تجربی تایید شده است [36, 37]. به‌منظور اعمال این فرض، رابطه نرخ برش و همچنین تانسور گرادیان سرعت پلاستیک ناشی از بازگشت توپینینگ به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$f^\alpha = -\dot{f}_0 \left( \frac{|\tau^\alpha|}{\tau_y^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \rightarrow \tau = \begin{cases} \tau & \text{if } \tau \leq 0 \\ 0 & \text{if } \tau > 0 \end{cases} \quad (19)$$

$$L_{detwin}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} \dot{f}^\alpha \gamma_{tw} s_{tw}^\alpha \otimes n_{tw}^\alpha \quad (20)$$

از رابطه (۱۹) می‌توان دریافت که در بازگشت توپینینگ بر خلاف توپینینگ، مقدار نمو کسر حجمی توپینینگ، منفی است و این بدین مفهوم است که کسر حجمی توپینینگ کاهش می‌یابد. شایان ذکر است که روابطی مشابه با رابطه (۱۹) پیش از این نیز برای مدل‌سازی بازگشت توپینینگ هم در مدل‌های خودسازگار [30] و هم در مدل‌های کریستال پلاستیسیته اجزای محدود استفاده شده است [19, 23, 29].

### ۴-۲- روش حل معادلات کریستال پلاستیسیته اجزای محدود در

#### مقیاس ماکروسکوپی

در مقیاس ماکرو، معادلات روش اجزای محدود غیرخطی برای محاسبه جابجایی هر نقطه انتگرالگیری حل می‌شوند. جزئیات روش اجزای محدود غیرخطی در مرجع [38] تشریح شده است. معادله کلی تعادل هر نقطه مادی که باید به‌منظور محاسبه جابجایی و به‌دنبال آن کرنش در هر نقطه انتگرالگیری حل شود، عبارت است از:

$$f^{int} = f^{ext} \quad (21)$$

طبق اصول اجزای محدود غیرخطی نیروی درونی در هر نقطه انتگرالگیری ( $f^{int}$ ) تابعی از مقدار تنش در آن نقطه است [38]. مقدار تنش در هر نقطه انتگرالگیری توسط الگوریتم کریستال پلاستیسیته درون سابروتین UMAT محاسبه شده و به حلگر اجزای محدود ارسال می‌شود تا مجموعه معادلات (۲۱) پس از انجام مراحل مونتاز ماتریس‌های سختی در مقیاس ماکرو حل شوند. پس از محاسبه تانسور گرادیان تغییر شکل الاستیک در حالت همگرادشده، تانسور کرنش لاگرانژی در زمینه و بخش توپین شده قابل محاسبه است:

$$E^e = \frac{1}{2} (F^e T F^e - I) \quad (22)$$

پس از محاسبه تانسور کرنش لاگرانژی، تانسور تنش پیولا-کیرشرف نوع دوم نیز به شکل زیر به‌دست می‌آید [9, 27].

$$S = (1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha) S^{parent} + \sum_{\alpha=1}^{N_{tw}} f^\alpha S^\alpha \quad (23)$$

که در آن:

توینینگ و لغزش مجدد است.  $a_{sl}$  و  $a_{tw}$  ثوابت مادی هستند که کنترل کننده نحوه تغییر نرخ سخت‌شوندگی حین تغییر شکل است. تمامی معادلات آمده در بخش (۲) در قالب یک سابروتین UMAT کدنویسی شده و توسط نرم‌افزار اجزای محدود آباکوس حل شده‌اند. انتگرال‌گیری زمانی از معادلات کریستال پلاستیسیته به روش ضمنی و مطابق الگوی توسعه‌دهنده در مرجع [10] انجام شده است.

### ۳- نتایج

آلیاژ AZ31 یکی از آلیاژهای کار شده منیزیم است. این آلیاژ از طریق فرآیند نورد و به شکل ورق فلزی تولید می‌شود. در نتیجه فرآیند نورد، بافت ترجیحی بسیار شدید در آن ایجاد می‌شود و این بافت ترجیحی عامل بروز رفتارهای ناهمسانگرد در این آلیاژ است. به‌منظور تحلیل اجزای محدود ورق‌های فلزی، سه جهت رایج در نظر گرفته می‌شود که به‌ترتیب راستای نورد (RD)، عمود بر راستای نورد (ND) و راستای عرضی (TD) هستند (شکل ۱).

در مورد ورق منیزیم، توینینگ کششی زمانی فعال خواهد شد که بارگذاری فشاری در راستای جهت نورد بر ورق اعمال شود. دیگر نوع بارگذاری که فعال‌کننده توینینگ کششی است، بارگذاری کششی در راستای عمود بر صفحه ورق است. نظر به یکسان بودن مکانیزم‌های تغییر شکل برای دو بارگذاری فشاری در راستای جهت نورد و کششی در راستای عمود بر صفحه ورق در این بخش فقط بارگذاری کششی در راستای عمود بر صفحه ورق مدل شده است. ثوابت الاستیک فلز منیزیم در جدول ۱ ارایه شده‌اند که از مرجع [33] استخراج شده‌اند.

جدول ۱) ثوابت الاستیک فلز منیزیم (برحسب گیگاپاسکال)

$C_{55}$	$C_{33}$	$C_{13}$	$C_{12}$	$C_{11}$
۱۶/۶	۶۱/۲	۲۰/۸	۲۰	۵۸

در شکل ۲، سیستم‌های لغزش و توینینگ در نظر گرفته شده در تحلیل کریستال پلاستیسیته نمایش داده شده است. راستای  $c$  عمود بر صفحه باسال (صفحه قاعده‌ای) است. به‌منظور انجام شبیه‌سازی‌های مبتنی بر روش اجزای محدود و تئوری همگن‌سازی محاسباتی، ابتدا باید المان حجمی معرف (RVE) با همان خواص پلی‌کریستال واقعی تولید شود. در این ساختار، منظور از المان حجمی معرف، مجموعه‌ای از دانه‌های پلی‌کریستال است که دارای جهت‌گیری فضایی مشابه با دانه‌های پلی‌کریستال واقعی باشند. اندازه المان حجمی معرف به‌وسیله تعداد دانه‌های گنجانده شده در آن مشخص می‌شود. به‌منظور انجام شبیه‌سازی‌های این بخش، المان حجمی معرف دربردارنده ۶۴ دانه به‌وسیله نرم‌افزار منبع‌باز Dream.3D تولید شده است [39]. این المان حجمی در شکل ۳ نشان داده شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌ها از المان C3D8 استفاده شده است. این المان پیش از این نیز با موفقیت برای شبیه‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 استفاده شده است [18]. از آنجا که در

$$S^{parent} = CE^e \quad (30)$$

$$S^\alpha = C^\alpha E^e \quad (31)$$

$C$  ماتریس الاستیک زمینه و  $C^\alpha$  ماتریس الاستیک بخش توین شده است که از طریق چرخش ماتریس زمینه به‌وسیله ماتریس دوران توینینگ به‌دست می‌آید. ماتریس دوران برای هر سیستم توینینگ به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$Q^\alpha = 2n_{tw}^\alpha \otimes n_{tw}^\alpha - I \quad (32)$$

تنش برشی تجزیه‌شده روی صفحات لغزش و توینینگ عبارت است از:

$$\tau^i = S^{parent} : s_{sl}^i \otimes n_{sl}^i \quad (33)$$

$$\tau^\alpha = S^{parent} : s_{tw}^\alpha \otimes n_{tw}^\alpha \quad (34)$$

تنش کوشی پس از انتقال (Push Forward) تانسور پیولا کرشرف نوع دوم از پیکربندی میانی به پیکربندی جاری به‌دست می‌آید. این انتقال به‌وسیله تانسور گرادیان تغییر شکل الاستیک به شکل زیر انجام می‌شود:

$$T = J^{-1} F^e S F^e T \approx R^e S R^e T \quad (35)$$

در رابطه بالا، فرض شده که تغییر شکل الاستیک در مقابل تغییر شکل پلاستیک قابل چشم‌پوشی است. تانسور  $R^e$  نیز از تجزیه قطبی تانسور گرادیان تغییر شکل به‌دست می‌آید. دو تانسور مورد نیاز برای ادامه حل اجزای محدود تانسورهای تنش کوشی و ماتریس ژاکوبین هستند. این دو تانسور پس از همگرایی در هر پله بار به حلگر گلوبال در سابروتین UMAT محاسبه شده و به حلگر اجزای محدود آباکوس (ABAQUS) ارسال می‌شوند تا از این طریق بردارهای جابجایی و مقادیر کرنش در هر نقطه انتگرال‌گیری محاسبه شوند.

### ۵-۲- نحوه مدل‌سازی سخت‌شوندگی

از مدل کوتاری-آناند برای مدل‌سازی سخت‌شوندگی ناشی از برهم‌کنش سیستم‌های لغزش و توینینگ استفاده شده است. ضابطه این مدل از قرار زیر است [9, 18]:

$$\dot{\tau}_y^i = q_{sl-sl} \sum_{j=1}^{N_{sl}} h_{0j} \left( 1 - \frac{\tau_j^i}{\tau_{sat}^j} \right)^{a_{sl}} |\dot{\gamma}^j| + \quad (36)$$

$$q_{tw-sl} \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} h_{0\beta} \left( 1 - \frac{\tau_\beta}{\tau_{sat}^\beta} \right)^{a_{tw}} |\dot{\gamma}^\beta|$$

$$\dot{\tau}_y^\alpha = q_{tw-tw} \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} h_{0\beta} \left( 1 - \frac{\tau_\beta}{\tau_{sat}^\beta} \right)^{a_{tw}} f^\alpha \dot{\gamma}_{tw}^\alpha \quad (37)$$

$$\dot{\tau}_y^{i*} = q_{sl-sl} \sum_{j=1}^{N_{re-sl}} h_{0j} \left( 1 - \frac{\tau_j^i}{\tau_{sat}^j} \right)^{a_{sl}} |\dot{\gamma}^j| \quad (38)$$

در روابط سه‌گانه بالا،  $\tau_y$ ،  $\tau_{sat}$  به‌ترتیب مقادیر تنش برشی تجزیه‌شده، مقاومت سیستم تغییر شکل و مقدار مقاومت اشباع سیستم تغییر شکل هستند. سیستم‌های لغزش، توینینگ و لغزش در بخش توین شده به‌ترتیب با اندیس‌های  $i$ ،  $\alpha$  و  $i^*$  نشان داده شده‌اند.  $q_{sl-sl}$ ،  $q_{tw-tw}$  و  $q_{tw-sl}$  مقادیر ماتریس سخت‌شوندگی هستند و به‌ترتیب توصیف‌کننده اثر سیستم‌های لغزش روی یکدیگر، سیستم‌های توینینگ روی یکدیگر و توینینگ روی لغزش هستند.  $h_0$  مقادیر نرخ سخت‌شوندگی اولیه برای لغزش،



سخت‌شوندگی موجود است. این سه پارامتر به ترتیب تنش اولیه تجزیه شده بحرانی، تنش بحرانی اشباع شده و نرخ اولیه سخت‌شوندگی هستند. مقادیر این سه پارامتر مادی برای آلیاژ AZ31 در جدول ۲ ارائه شده‌اند. این پارامترها از مقاله هرر و همکاران برداشت شده‌اند [18].

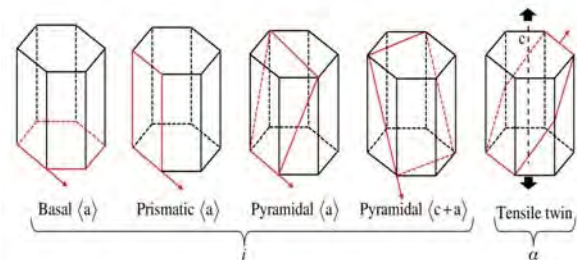
جدول ۲) پارمترهای مادی متناظر با آلیاژ AZ31 استفاده شده در قانون سخت‌شوندگی کوتاری-آناند (برحسب مگاپاسگال)

مد تغییر شکل	$\tau_0$	$\tau_s$	$h_0$
لغزش قاعده‌ای	۲۳	۲۵	۲۰
هرمی نوع دوم	۸۸	۱۷۹	۲۹۹۰
لغزش منشوری	۸۰	۹۴	۲۸۳۱
توینینگ کششی	۳۵	۵۹	۲۴

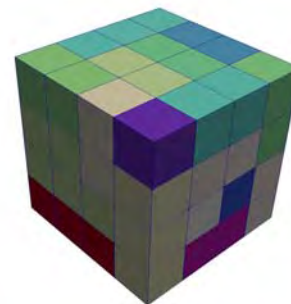
در این پژوهش، روشی موسوم به روش بهینه‌سازی معکوس برای استخراج ثوابت مادی تک کریستال توسعه داده شد. توینینگ از دو طریق باعث افزایش تنش بحرانی مورد نیاز برای لغزش می‌شود. جنبه اول ناشی از تغییر جهت کریستال به مقدار ۸۶ درجه و جنبه دوم ناشی از مرزهای توینینگ است که مانند مانعی در مقابل حرکت نابجایی‌های لغزش عمل می‌کنند [40, 41]. این دو جنبه از طریق ثابت  $q_{TW-sl}$  در نظر گرفته شده است. به منظور احتساب اثر بازدارندگی توینینگ بر لغزش مقدار این ثابت برابر ۲ قرار داده شده است [18]. نماهای سخت‌شوندگی متناظر با لغزش و توینینگ به ترتیب  $a_{TW}$  و  $a_{sl}$  هستند که مقدار این دو ثابت به ترتیب ۰/۶ و ۱ قرار داده شده است [17, 18]. کمیت دیگر مقدار پارامتر حساسیت به نرخ است. این کمیت در معادله نرخ برش ناشی از لغزش و توینینگ با  $m$  نشان داده شده است و تاثیر زیادی روی همگرایی و صحت پاسخ‌های شبیه‌سازی می‌گذارد. مقدار کمیت حساسیت به نرخ برابر  $m = 0/1$  قرار داده شده است [17, 18]. از آنجا که آلیاژ AZ31 جزء گروه آلیاژهای کار شده منیزیم است و به روش نورد تولید می‌شود، دارای بافت ترجیحی بسیار قوی است؛ به شکلی که محور c-axis اکثریت دانه‌ها در راستای عمود بر صفحه ورق یا به بیان دیگر، در راستای عمود بر راستای نورد است.

در این بررسی از تابع توزیع جهت (ODF) تجربی آلیاژ منیزیم نورد گرم شده AZ31 در مرجع [18] استفاده شده است. به منظور حصول اطمینان از ایجاد بافت ترجیحی در المان حجمی معرف نمودارهای قطبی متناظر با لغزش منشوری روی صفحه  $\{10\bar{1}0\}$  و توینینگ  $\{0002\}$  در شکل ۴ با یکدیگر مقایسه شده‌اند. از آنجا که المان حجمی معرف دارای ۶۴ دانه است، تعداد ۶۴ جهت فضایی از تابع توزیع جهت تجربی برگزیده شده و به دانه‌ها اختصاص داده شده است؛ به نحوی که نمودارهای قطبی تجربی و اختصاص داده شده تا حد امکان منطبق بر هم باشند. همان گونه که در شکل ۴ قابل مشاهده است، نمودارهای قطبی تجربی و نمودارهای قطبی اختصاص داده شده به المان‌های المان حجمی معرف مشابه با یکدیگر هستند و این تشابه بیانگر آن است که بافت ترجیحی

این تحلیل از مدل پلی کریستال برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است، لازم است که تفاوت جهت‌گیری فضایی دانه‌ها در تحلیل دیده شود. تفاوت جهت‌گیری فضایی دانه‌ها از طریق اختصاص رنگ‌های متفاوت به هر دانه در مدل اجزای محدود شکل ۳ قابل تشخیص است که هر رنگ نمایانگر یک جهت‌گیری فضایی است. در کلیه شبیه‌سازی‌ها، شرایط مرزی پرئودیک به وجوه المان حجمی معرف اعمال شده و مساله در مقیاس میکروسکوپی توسط حلگر اجزای محدود، حل شده است. روش اعمال شرایط مرزی پرئودیک در مرجع [18] آمده است. در صورتی که اندازه المان حجمی معرف (تعداد دانه‌های گنجانده شده در آن) مناسب باشد پاسخ آن به پاسخ پلی کریستال نزدیک خواهد بود.



شکل ۲) سیستم‌های لغزش و توینینگ در نظر گرفته شده در تحلیل کریستال پلاستیسته



شکل ۳) نمای المان معرف تولید شده شامل ۶۴ دانه و گسسته‌سازی هر دانه با یک المان اجزای محدود

در این مقاله فرض شده است که تغییر شکل پلاستیک به وسیله پنج مکانیزم تغییر شکل لغزش روی صفحه قاعده‌ای، لغزش روی صفحه هرمی نوع دوم، لغزش روی صفحات منشوری، توینینگ کششی و بازگشت توینینگ کششی روی می‌دهد. این فرض در تطابق کامل با مطالعات تجربی انجام شده روی آلیاژهای کار شده منیزیم است. همچنین در تحقیقات بسیاری از همین مکانیزم‌های تغییر شکل برای شبیه‌سازی رفتار آلیاژهای منیزیم استفاده شده است [15-18]. به منظور مدل‌سازی سخت‌شوندگی سیستم‌های لغزش و توینینگ در آلیاژ AZ31، از قانون سخت‌شوندگی ارائه شده به وسیله کوتاری و آناند [19] استفاده شده است. این قانون سخت‌شوندگی دارای ماهیت پدیده شناختی است و برای کالیبره کردن آن فقط به سه پارامتر مادی  $\tau_0$ ،  $\tau_s$  و  $h_0$  مورد نیاز است و این یکی از برتری‌های آن در مقایسه با دیگر قوانین

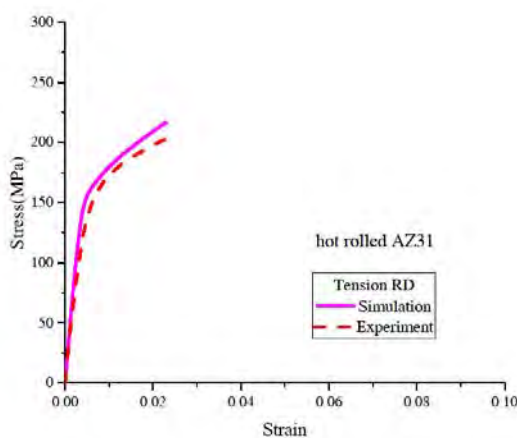
به درستی ایجاد و در المان حجمی معرف القا شده است. در این حالت می‌توان انتظار داشت که پاسخ‌های ناشی از مدل در تطابق با روندهای تجربی باشد.

**۱-۳-۱- شبیه‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 به‌ازای بارگذاری تک‌محوری**  
آلیاژ AZ31 یکی از آلیاژهای کار شده منیزیم است. این آلیاژ از طریق فرآیند نورد و به شکل ورق فلزی تولید می‌شود. در نتیجه فرآیند نورد، بافت ترجیحی بسیار شدید در آن ایجاد می‌شود و این بافت ترجیحی عامل بروز رفتارهای ناهمسانگرد در این آلیاژ است. به‌منظور تحلیل اجزای محدود ورق‌های فلزی، سه جهت رایج در نظر گرفته می‌شود که به‌ترتیب راستای نورد (RD)، عمود بر راستای نورد (ND) و راستای عرضی (TD) هستند (شکل ۲).

در ادامه این بخش رفتار مکانیکی این آلیاژ به‌ازای بارگذاری‌های تک‌محوری وارده در راستای جهت نورد و پس از آن در راستای عمود بر صفحه ورق با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته و روش همگن‌سازی محاسباتی ارایه خواهد شد.

**۱-۳-۱-۱- شبیه‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 به‌ازای بارگذاری کششی در راستای جهت نورد (RD)**

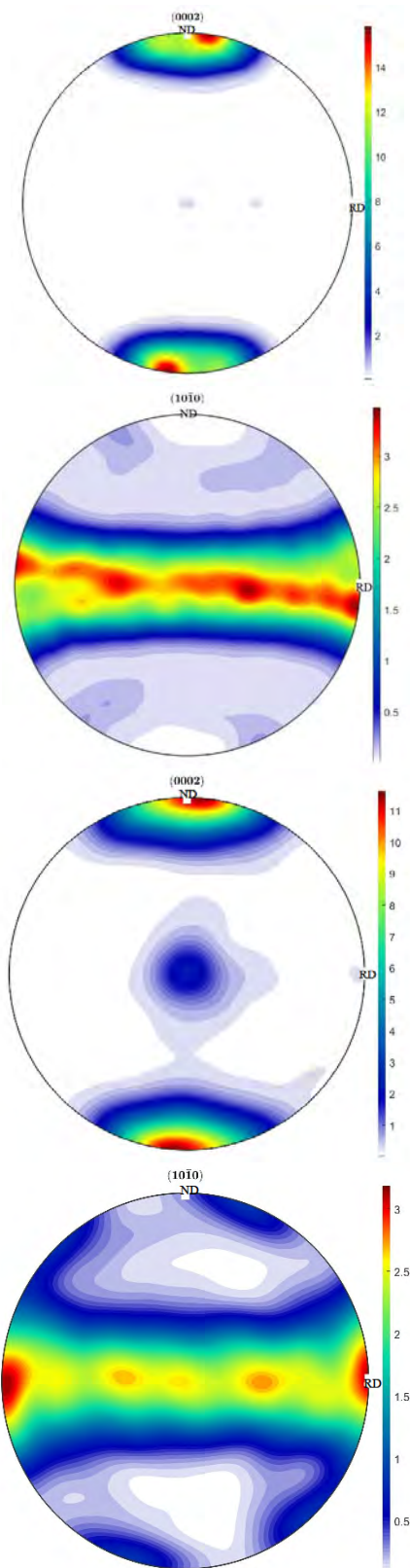
به‌منظور انجام این شبیه‌سازی، یک المان حجمی معرف که دربردارنده ۶۰۰ دانه است، در نظر گرفته شده است. هر دانه به‌طور تقریبی دارای ۸ المان اجزای محدود است. در نمودار ۱، نمودارهای تجربی و مدل‌سازی شده با یکدیگر مقایسه شده‌اند که همانندی بسیار خوبی بین دو نمودار مشاهده می‌شود و مدل ارایه شده توانسته تمامی مشخصه‌های منحنی تجربی را به‌درستی بازتولید کند.



نمودار ۱) مقایسه نمودارهای تجربی و مدل‌سازی شده به‌ازای بارگذاری کششی در راستای جهت نورد (RD): منحنی‌های تجربی از مرجع<sup>[42]</sup> درج شده‌اند.

**۲-۱-۳- شبیه‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 به‌ازای بارگذاری فشاری در راستای عمود بر صفحه ورق (ND)**

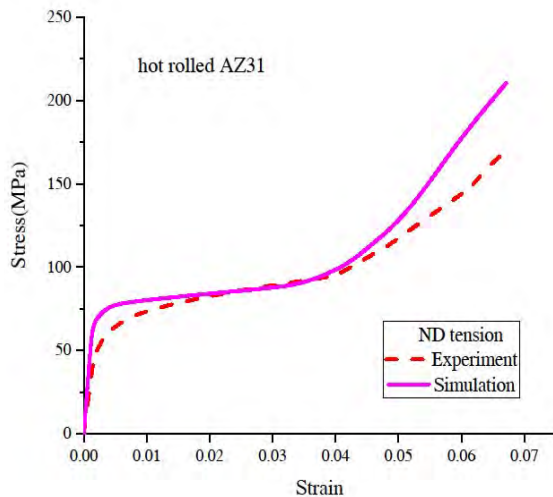
به‌منظور انجام این شبیه‌سازی از المان حجمی معرف مشابه با حالت قبل استفاده شده است. تعداد المان‌های گنجانده شده در المان حجمی معرف ۴۹۱۳ عدد است. تعداد دانه‌ها تقریباً ۶۰۰ عدد و هر دانه با به‌طور میانگین ۸ المان مش‌بندی شده است. در نمودار ۲، نمودار مدل‌سازی شده با نمودار تجربی به‌ازای این حالت بارگذاری ارایه شده است که در این حالت نیز تطابق بسیار خوبی بین دو نمودار



شکل ۴) مقایسه نمودارهای قطبی برای دو صفحه  $\{0002\}$  و  $\{10\bar{1}0\}$  (دو نمودار تجربی در بالا و دو نمودار کاهش‌یافته در پایین نمایش داده شده‌اند)



تویینینگ به‌طور ناگهانی گسترش یافته و این عامل باعث اعمال اثر سخت‌شوندگی به دیگر مدهای لغزشی تغییر شکل خواهد شد. این پدیده از واریسی دو نمودار تجربی و مدل‌سازی شده (نمودار ۳) قابل تشخیص است که مقدار نرخ سخت‌شوندگی پس از کرنش حدود ۳٪ روند افزایشی به خود گرفته است.



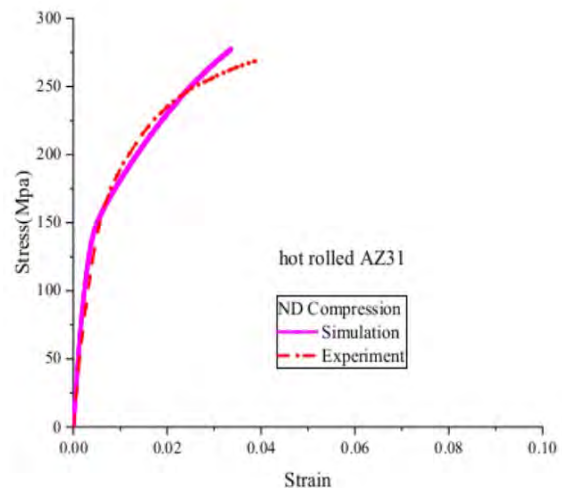
نمودار ۳) مقایسه نمودارهای تجربی و مدل‌سازی شده به‌ازای بارگذاری کششی در راستای عمود بر صفحه ورق (ND)؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [42] درج شده‌اند.

### ۲-۳- مدل‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 به‌ازای بارگذاری سیکلی فشاری-کششی در راستای جهت نورد (RD)

به‌منظور انجام شبیه‌سازی‌های سیکلی مقدار پارامتر نرخ حساسیت برابر با ۱/۱۰ استفاده شده است. شایان ذکر است که هدف این مقاله بررسی اثر نرخ بارگذاری بر رفتار مکانیکی آلیاژهای منیزیم نیست. با انتخاب این مقدار برای پارامتر نرخ حساسیت، توازن بین صحت پاسخ‌ها و هزینه‌های محاسباتی ایجاد خواهد شد. کلیه بارگذاری‌های سیکلی به شکل فشاری-کششی در راستای جهت نورد بر مدل اعمال شده است. دلیل انتخاب این بارگذاری در دسترس بودن داده‌های تجربی برای مقایسه است.

به‌منظور انجام شبیه‌سازی‌های سیکلی از یک المان حجمی معرف شامل ۶۴ دانه استفاده شده است که هر دانه با یک المان اجزای محدود گسسته‌سازی شده است. دلیل برگزیدن المان حجمی معرف شامل ۶۴ دانه، کاهش هزینه محاسباتی تحلیل کریستال پلاستیسیته است. به‌منظور انجام آنالیز همگرایی مش از سه المان حجمی معرف به‌ترتیب دارای ۴، ۸، و یک المان حجمی دارای ۲۶۷ دانه به‌طوری که هر دانه با ۱۲ المان اجزای محدود گسسته‌سازی شده است، استفاده شد. همان‌گونه که در نمودار ۴ نشان داده شده است، نتایج منحنی‌های سیکلی تنش-کرنش به‌ازای دامنه کرنش ۵۸٪/۰ تقریباً بر هم منطبق هستند. بنابراین در ادامه، به‌منظور کاهش هزینه‌های محاسباتی، از یک المان حجمی معرف دارای ۶۴ دانه برای انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است.

مشاهده می‌شود. از بررسی نمودارهای متناظر با کشش در راستای نورد و فشار در راستای عمود بر صفحه ورق می‌توان دریافت که مشخصه‌های تغییر شکل مانند نرخ سخت‌شوندگی و روند کلی نمودار همانند یکدیگر است. این بدین معناست که مکانیزم‌های حامل تغییر شکل پلاستیک در این دو نوع بارگذاری تقریباً یکسان است. در عین حال، همان‌گونه که از نمودارهای ۱ و ۲ قابل مشاهده است، مقدار تنش تسلیم به‌ازای بارگذاری فشاری در راستای عمود بر صفحه ورق در مقایسه با مقدار متناظر در نمودار کشش در راستای جهت نورد بیشتر است.



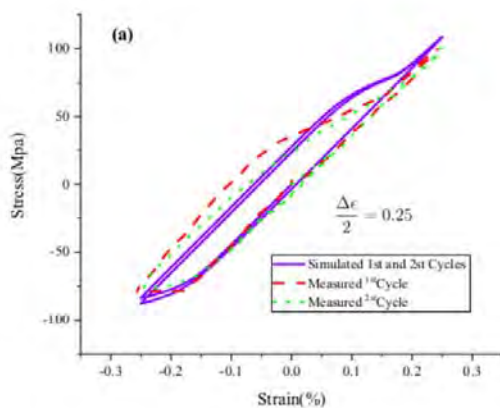
نمودار ۴) مقایسه نمودارهای تجربی و مدل‌سازی شده به‌ازای بارگذاری فشاری در راستای عمود بر صفحه ورق (ND)؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [42] درج شده‌اند.

### ۳-۱-۳- شبیه‌سازی رفتار آلیاژ AZ31 به‌ازای بارگذاری کششی در راستای عمود بر صفحه ورق (ND)

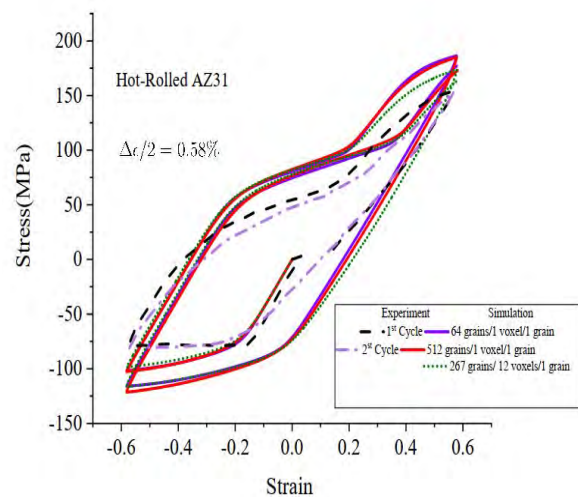
چنانکه پیش‌تر اشاره شد، زمانی که بارگذاری وارد شده به ورق باعث اعمال کشش در راستای محور C-axis کریستال شود، تویینینگ کششی فعال خواهد شد. از آنجا که ورق مورد بررسی دارای بافت ترجیحی قوی است و این بافت به المان حجمی معرف اعمال شده است، انتظار می‌رود بارگذاری کششی در راستای عمود بر صفحه ورق تویینینگ کششی را فعال نماید. در نمودار ۳، نمودارهای تجربی و به‌دست‌آمده از مدل ارایه شده به‌ازای این حالت بارگذاری با یکدیگر مقایسه شده‌اند که همانندی بسیار خوبی بین دو نمودار وجود دارد. در زمان بسیار کوتاهی پس از شروع بارگذاری، تویینینگ کششی فعال می‌شود و این فعالیت تا حدود کرنش ۳٪ ادامه می‌یابد. مطابق با مطالعات تجربی در فاصله بین شروع بارگذاری تا مقدار کرنش حدود ۳٪، هسته‌های تویینینگ در سرتاسر پلی‌کریستال ایجاد شده و با سرعت زیاد در عرض دانه‌ها گسترش پیدا می‌کنند. مرحله بعد، افزایش ضخامت لایه تویینینگ است. در این مرحله ضخامت لایه تویین شده افزایش یافته و همگام با افزایش مقدار کرنش تقریباً ۸۰٪ حجم دانه را اشغال خواهد کرد. بنابراین مرزهای

رویداد دیگری که پس از اشباع بازگشت توپینینگ به طور تجربی مشاهده شده است، افزایش ناگهانی نرخ سخت‌شوندگی است. این رخداد در تمامی نمودارهای ارائه شده در تمامی دامنه‌های کرنش آزموده شده قابل مشاهده است. دلیل افزایش نرخ سخت‌شوندگی برهم‌کنش قوی مدهای تغییر شکل منشوری و هرمی است. همان گونه که از نمودارها مشخص است، مدل به‌درستی افزایش نرخ سخت‌شوندگی پس از اتمام فرآیند بازگشت توپینینگ را بازتولید نموده است. روند تجربی دیگر که به‌خصوص در نمودارهای ۸، ۹، ۱۱ و ۱۳ قابل مشاهده است، به تاخیرافتادن نقطه وقوع بازگشت توپینینگ در سیکل دوم بارگذاری است. به دیگر بیان با افزایش مقدار کرنش وارده به ماده، اشباع بازگشت توپینینگ در مقدار کرنش بزرگ‌تری روی می‌دهد. دلیل فیزیکی این رویداد آن است که هرچه دامنه کرنش وارده به ماده بیشتر باشد، کسر حجمی توپینینگ در المان حجمی معرف نیز بیشتر خواهد شد و در نتیجه مقدار کرنش بیشتری برای بازگشت کسر حجمی توپینینگ مورد نیاز است. این موضوع باعث به تاخیرافتادن نقطه اشباع بازگشت توپینینگ در سیکل دوم بارگذاری نسبت به سیکل اول بارگذاری خواهد شد.

از نمودارهای ۸، ۹، ۱۱ و ۱۳ می‌توان دریافت که مدل ارائه شده به‌درستی تاخیر در وقوع نقطه بازگشت توپینینگ را شبیه‌سازی نموده است. در دامنه کرنش (۲۵٪)، توپینینگ به مقدار بسیار کم فعال خواهد شد و در نتیجه نقاط وقوع بازگشت توپینینگ متناظر با سیکل‌های اول و دوم منطبق بر یکدیگر هستند و این نکته در نمودار ۹ کاملاً مشهود است. با افزایش دامنه کرنش تفاوت موقعیت دو نقطه اشاره شده نسبت به هم کاملاً پدیدار می‌شود. مساله دیگر وابستگی کسر حجمی توپینینگ به مقدار دامنه کرنش است که با افزایش دامنه کرنش مقدار کسر حجمی توپینینگ نیز افزایش خواهد یافت. به‌منظور تایید این موضوع در نمودارهای ۱۰ و ۱۲، مقادیر کسر حجمی توپینینگ برای هر ۶ سیستم توپینینگ و دامنه‌های کرنش ۵٪ و ۵۸٪ ارائه شده است. واضح است که با افزایش دامنه کرنش مقدار کسر حجمی توپینینگ افزایش خواهد یافت و خروجی مدل در تطابق با روندهای تجربی است [37, 43].



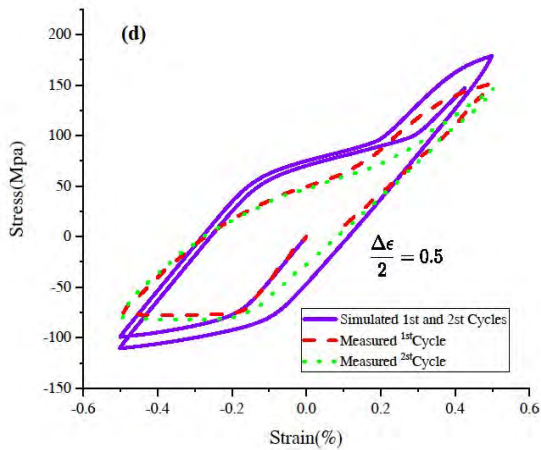
**نمودار ۵)** مقایسه نمودار مدل‌سازی شده و تجربی به‌زای بارگذاری کاملاً معکوس‌شونده کرنش- کنترل و دامنه کرنش ۲۵٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.



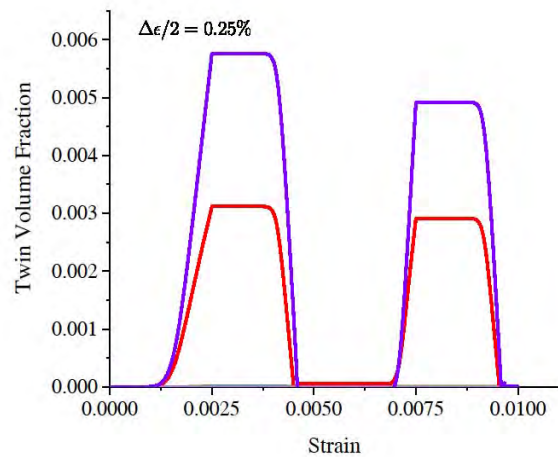
**نمودار ۴)** مقایسه نمودار مدل‌سازی شده و تجربی برای سه المان حجمی نماینده شامل ۶۴، ۵۱۲ و ۲۶۷ دانه به‌منظور ارزیابی همگرایی شبکه مدل اجزای محدود؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.

به‌منظور انجام مدل‌سازی سیکلی از داده‌های تجربی ارائه شده در مرجع [36] استفاده شده است. بارگذاری سیکلی به شکل کرنش- کنترل و کاملاً معکوس‌شونده در دامنه‌های کرنش ۲۵٪، ۳۳٪، ۴۲٪، ۵۰٪، ۵۸٪ و ۱٪ بر المان حجمی معرف اعمال شده است و پس از آن منحنی‌های تنش- کرنش متناظر با هر دامنه کرنش با منحنی‌های تجربی مقایسه شده است.

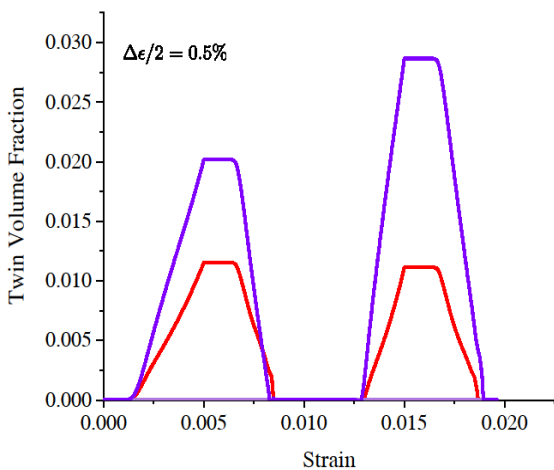
در نمودارهای ۵ تا ۱۳ (غیر از نمودارهای ۱۰ و ۱۲) حلقه‌های هیستریزس مدل‌سازی شده به‌زای بارگذاری‌های اشاره شده ترسیم شده است. همان گونه که از این نمودارها برمی‌آید، تطابق بسیار خوبی بین نمودارهای مدل‌سازی شده و نمودارهای تجربی در تمامی دامنه‌های کرنش وجود دارد. مدل ارائه شده به‌خوبی توانسته است که عدم تقارن در منحنی تنش- کرنش را به‌درستی شبیه‌سازی کند. دلیل فیزیکی این عدم تقارن، متفاوت بودن مکانیزم‌های تغییر شکل در هر بخش از منحنی است. در مرحله اول بارگذاری که فشار در راستای جهت نورد اعمال شده، توپینینگ کششی فعال می‌شود. در مرحله بعد که بارگذاری کششی در راستای جهت نورد اعمال آغاز می‌شود، بازگشت توپینینگ روی می‌دهد و مدل به‌درستی هر دو پدیده را شبیه‌سازی کرده است. بارگذاری معکوس کششی از نقطه پیشینه تنش فشاری در هر دو سیکل بازگشت توپینینگ را فعال خواهد کرد و این پدیده باعث کاهش کسر حجمی توپینینگ خواهد شد. زمانی که مقدار کسر حجمی متناظر با یک مد توپینینگ کاملاً برگشت داده شود، پدیده اشباع بازگشت توپینینگ روی خواهد داد. در این هنگام یک نقطه تقعر در منحنی تنش- کرنش ایجاد خواهد شد. پس از عبور از این نقطه، دیگر مکانیزم‌های تغییر شکل مانند لغزش روی صفحات قاعده‌ای، لغزش منشوری و هرمی حامل تغییر شکل پلاستیک هستند. از واریسی دو نمودار مشهود است که مدل به‌درستی توانسته پدیده اشباع بازگشت توپینینگ را درک کرده و محل وقوع آن را پیش‌بینی نماید.



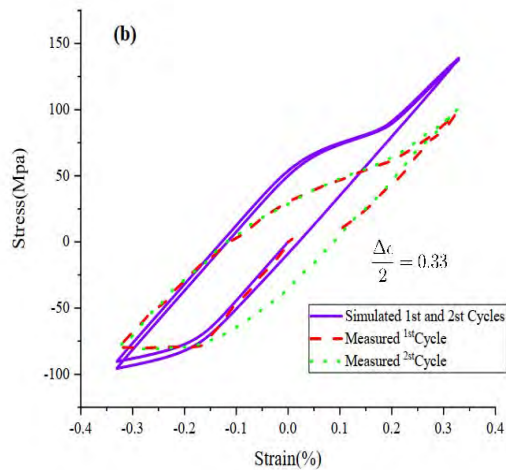
**نمودار ۹** مقایسه نمودارهای شبیه‌سازی شده و تجربی به‌ازای بارگذاری کرنش-کنترل در حالت کاملاً معکوس‌شونده در دامنه کرنش ۰/۵٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.



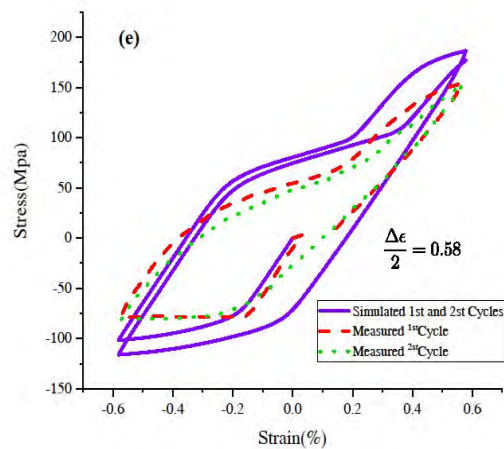
**نمودار ۶** نمودار نحوه تغییر کسر



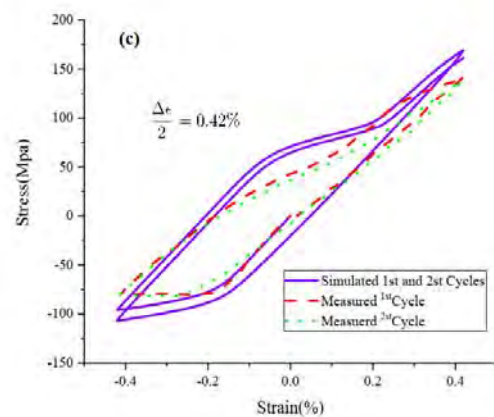
**نمودار ۱۰** نمودار نحوه تغییر کسر حجمی توپینینگ به‌ازای دامنه بارگذاری ۵/۰٪



**نمودار ۷** مقایسه نمودار مدل‌سازی شده و تجربی به‌ازای بارگذاری کاملاً معکوس‌شونده کرنش-کنترل و دامنه کرنش ۳۳/۰٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.



**نمودار ۱۱** مقایسه نمودارهای مدل‌سازی شده و تجربی در حالت بارگذاری کاملاً معکوس‌شونده با کنترل کرنش در دامنه کرنش ۵۸/۰٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.

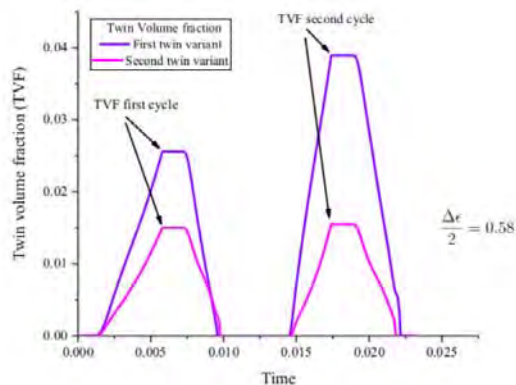


**نمودار ۸** مقایسه نمودار مدل‌سازی شده و تجربی به‌ازای بارگذاری کاملاً معکوس‌شونده کرنش-کنترل و دامنه کرنش ۴۲/۰٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.

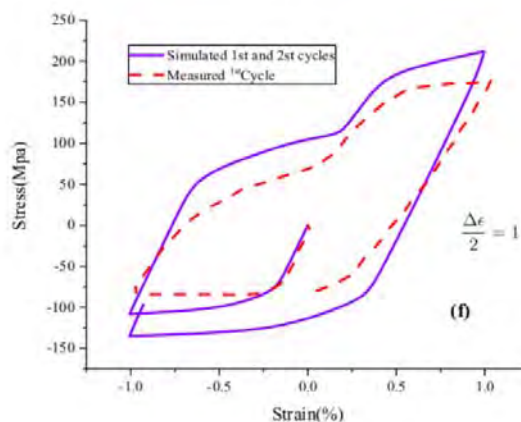
مختلف نشان داده شده است که شکست خستگی در آلیاژهای منیزیم بر اثر هم‌افزایی چهار عامل روی می‌دهد. عامل اول، تشکیل باندهای لغزشی دائمی است؛ عامل دوم، ایجاد تمرکز تنش در مرز دانه‌ها است که به دلیل تفاوت سیستم‌های لغزشی و توپینینگ در دانه‌های مجاور هم روی می‌دهد که در نتیجه این تمرکز تنش، ترک مرز دانه‌ای (Grain Boundary Cracking) در آلیاژ اتفاق می‌افتد؛ عامل سوم، محل برخورد نوارهای توپینینگ با مرز دانه‌ها است؛ مورد چهارم نیز ایجاد ترک در مرزهای نوارهای توپین شده است [45, 47, 48]. مدل‌های خستگی ماکروسکوپیکی نمی‌توانند تأثیر این مکانیزم‌های وابسته به ریزساختار ماده را لحاظ کنند و نیاز است که از مدل‌های خستگی حساس به ریزساختار برای توصیف خستگی در این مواد استفاده نمود.

رویکرد دوم که در حال حاضر در حال توسعه است، مدل‌های خستگی میکروسکوپیکی است. در این دسته، از تئوری‌های کریستال پلاستیسیته برای ارزیابی توزیع فضایی تنش و کرنش و دیگر متغیرهای میدان استفاده می‌شود. به‌منظور انجام تحلیل خستگی با مدل‌های حساس به ریزساختار ماده، تمامی مشخصه‌های ریزساختار ماده شامل شکل دانه‌ها، توزیع اندازه دانه‌ها، توزیع جهت‌گیری فضایی دانه‌ها و شکل مرز دانه‌ها در تحلیل وارد می‌شوند و در نتیجه آن، پاسخ آنها منطبق بر مشخصات واقعی ماده است. پس از انجام شبیه‌سازی توسط مدل وابسته به ریزساختار، از طریق توسعه پارامتر نمایانگر خستگی (Fatigue Indicator FIP Parameter) می‌توان عمر خستگی را تخمین زد. در مرجع [20] برخی از مهم‌ترین پارامترهای نمایانگر خستگی برشمرده شده است. شایان ذکر است که پارامترهای نمایانگر خستگی از طریق خروجی‌های تحلیل کریستال پلاستیسیته مانند نرخ لغزش روی صفحات کریستالی محاسبه می‌شوند و بنابراین وجود یک مدل کریستال پلاستیسیته متناسب با ساختار ماده و دربردارنده کلیه مکانیزم‌های فعال حین تغییر شکل الزامی است. این رویکرد در حال حاضر پیشرفته‌ترین روش تخمین عمر خستگی است و در حال توسعه است [49-51].

در مورد آلیاژهای منیزیم، سه مدل برای شبیه‌سازی رفتارهای سیکی تاکنون ارائه شده است. مدل اول موسوم به مدل خودسازگار ویسکوپلاستیک است که اخیراً قابلیت مدل‌سازی بازگشت توپینینگ به آن افزوده شده است [30]. این مدل‌ها به دلیل دارا بودن ماهیت خودسازگار نمی‌توانند توزیع فضایی متغیرهای میدان را ایجاد کنند و بنابراین کاربرد اصلی آنها در بازتولید منحنی تنش-کرنش ماکروسکوپیکی است. دسته دیگر مدل‌های بر پایه تئوری کریستال پلاستیسیته هستند که می‌توانند توزیع فضایی متغیرهای میدان را ایجاد کنند. تاکنون دو مدل در این راستا ارائه شده‌اند که هر دوی آنها فقط توانسته‌اند یک سیکل بارگذاری شامل فشار-کشش در راستای نورد را شبیه‌سازی کنند و منحنی سیکی تنش-کرنش کامل در سیکل‌های متوالی شبیه‌سازی نشده است [28, 29, 43, 52].



نمودار ۱۲) نحوه تغییر کسر حجمی توپینینگ در دو سیکل بارگذاری و دامنه کرنش  $\Delta\epsilon/2 = 0.58\%$



نمودار ۱۳) مقایسه نمودارهای شبیه‌سازی شده و تجربی به‌ازای بارگذاری کرنش-کنتزل در حالت کاملاً معکوس‌شونده در دامنه کرنش ۱٪؛ منحنی‌های تجربی از مرجع [36] درج شده‌اند.

#### ۴- بحث و بررسی نتایج

در این پژوهش، یک مدل کریستال پلاستیسیته اجزای محدود برای شبیه‌سازی رفتارهای تک‌محوری و سیکی آلیاژ نورد گرم شده منیزیم AZ31 ارائه شد. در بخش قبل نشان داده شد که مدل ارائه شده قادر است تا مشخصه‌های منحنی تنش-کرنش سیکی را با کیفیت قابل قبولی شبیه‌سازی نماید. خستگی، پدیده‌ای است که در بارگذاری سیکی روی می‌دهد و در حالت کلی به دو نوع کم‌چرخه و پرچرخه قابل تفکیک است. ارزیابی خستگی در هر دو حالت از مراحل حیاتی چرخه طراحی هر محصول است. در حال حاضر دو رویکرد برای مدل‌سازی خستگی وجود دارد. در رویکرد اول از مدل‌های سنتی شامل مدل‌های مانسون-کافین، اسمیت-واتسون-تاپر و مدل‌های بر پایه انرژی ذخیره‌شده یا هدررفته برای ارزیابی خستگی استفاده می‌شود [44-46]. نقص اصلی تمامی این مدل‌ها از ماهیت ماکروسکوپیکی آنها ناشی می‌شود. به بیان دقیق‌تر، این مدل‌ها فقط می‌توانند منحنی‌های تنش و کرنش و حلقه‌های هیستریزیس ماکروسکوپیکی را شبیه‌سازی نمایند. در تحقیقات



**سهم نویسندگان:** محمد جلیلی (نویسنده اول)، نگارنده مقدمه/پژوهشگر اصلی/نگارنده بحث (۵۰٪)؛ بهزاد سلطانی (نویسنده دوم)، روش‌شناس (۳۰٪)؛ علی نایبی (نویسنده سوم)، روش‌شناس (۲۰٪)

**منابع مالی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.

#### منابع

- 1- Shafteel H, Jackson R, Callery S, Bailey D, editors. Global climate change: Vital signs of the planet, NASA Jet Propulsion Laboratory [Internet]. California: NASA's Jet Propulsion Laboratory; 2017 [Cited 2018 December 30]. Available from: <https://climate.nasa.gov>.
- 2- epa.gov [Internet]. Washington: United States Environmental Protection Agency; 2017 [Cited 2018 December 30]. Available from: <https://www.epa.gov/climatechange/ghgemissions/inventoryexplorer/>.
- 3- Natural Resources Canada. Learn the facts: Weight affects fuel consumption [Internet]. Canada: Natural Resources Canada; 2017 [Cited 2018 December 30]. Available from: <http://www.nrcan.gc.ca/energy/efficiency/transportation/cars-lighttrucks/buying/16755>.
- 4- Bishop JDK, Martin NPD, Boies AM. Cost-effectiveness of alternative powertrains for reduced energy use and CO2 emissions in passenger vehicles. *Applied Energy*. 2014;124:44-61.
- 5- Fontaras G, Zacharof NG, Ciuffo B. Fuel consumption and CO2 emissions from passenger cars in Europe – Laboratory versus real-world emissions. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2017;60:97-131.
- 6- Taylor GI. Plastic Strain in Metals. *Journal of the Institute of Metals*. 1938;(62):307-324.
- 7- Agnew SR, Ozgur D. Plastic anisotropy and the role of non-basal slip in magnesium alloy AZ31B. *International Journal of Plasticity*. 2005;21(6):1161-1193.
- 8- Houtte PV. Simulation of the rolling and shear texture of brass by the Taylor theory adapted for mechanical twinning. *Acta Metallurgica*. 1978;26(4):591-604.
- 9- Kalidindi SR. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1998;46(2):267-271.
- 10- Kalidindi SR, Bronkhorst CA, Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1992;40(3):537-569.
- 11- Peirce D, Asaro RJ, Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica*. 1982;30(6):1087-1119.
- 12- Peirce D, Asaro RJ, Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*. 1983;31(12):1951-1976.
- 13- Asaro JR. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in Applied Mechanics*. 1983;23:1-115.
- 14- Staroselsky A, Anand L. A constitutive model for hcp materials deforming by slip and twinning: Application to magnesium alloy AZ31B. *International Journal of Plasticity*. 2003;19(10):1843-1864.
- 15- Graff S, Brocks W, Steglich D. Yielding of magnesium: From single crystal to polycrystalline aggregates. *International Journal of Plasticity*. 2007;23(12):1957-1978.

مدل ارائه‌شده در این تحقیق، قادر است که منحنی کامل تنش- کرنش سیکلی را با دقت قابل قبول شبیه‌سازی نماید. به‌علاوه، امکان ارزیابی مقادیر تنش و کرنش در درون دانه‌ها و مرزهای بین دانه‌ای وجود خواهد داشت. از این رو مدل ارائه‌شده در این مقاله به‌دلیل دارا بودن قابلیت ارائه توزیع فضایی متغیرهای میدان مانند تنش و کرنش و همچنین امکان مدل‌سازی اثر تمرکز تنش در مرز دانه‌ها می‌تواند در تحلیل‌های آتی خستگی وابسته به ریزساختار، مورد استفاده قرار گیرد. به‌منظور استفاده بهینه از مدل ارائه‌شده لازم است تا برخی اصلاحات در نظر گرفته شود؛ یکی از این موارد مدل‌سازی یک دانه با چندین المان اجزای محدود است و در این حالت گرادین‌های تنش و کرنش با دقت بسیار بیشتری توصیف می‌شوند.

#### 0- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله با بهره‌گیری از ترکیب تئوری‌های کریستال پلاستیسیته اجزای محدود و همگن‌سازی محاسباتی رفتارهای تک‌محوری و سیکلی آلیاژ نورد گرم‌شده منیزیم با نام تجاری AZ31 شبیه‌سازی شد. شبیه‌سازی‌های تک‌محوری روی یک المان حجمی معرف دارای ۶۰۰ دانه انجام شد. در حالت سیکلی نیز از یک المان حجمی معرف شامل ۶۴ دانه استفاده شد. در حالت تک‌محوری نشان داده شد که مدل ارائه‌شده قادر است تا ناهمسانگردی رفتار ماده را به‌درستی درک نموده و شبیه‌سازی نماید. این موضوع از طریق شبیه‌سازی منحنی‌های کشش در جهت نورد (RD)، کشش در جهت عمود بر صفحه ورق (ND) و فشار در جهت عمود بر صفحه ورق (ND) نشان داده شد. همچنین بیان شد که دلیل ناهمسانگردی وقوع یا عدم وقوع توپینینگ است. کارایی مدل در حالت بارگذاری سیکلی به شکل کرنش- کنترل در دامنه‌های کرنش ۰/۲۵، ۰/۳۳، ۰/۴۲، ۰/۵، ۰/۵۸ و ۱٪ در دو سیکل و به شکل فشاری- کششی در راستای جهت نورد بر مدل اجزای محدود نشان داده شد و نتایج مدل در تطابق خوبی با منحنی‌های تجربی است. مدل ارائه‌شده ریزال مشخصه‌های مشاهده‌شده در منحنی‌های تجربی مانند عدم تقارن در کشش و فشار ناشی از توپینینگ و بازگشت توپینینگ، نقطه تغییر تقعر در منحنی متناظر با بازگشت توپینینگ و مقادیر بیشینه تنش‌های کششی و فشاری را با دقت قابل قبول شبیه‌سازی کرده است.

**تشکر و قدردانی:** موردی توسط نویسندگان بیان نشده است.

**تأییدیه اخلاقی:** این مقاله تاکنون در نشریه دیگری (به‌طور کامل یا بخشی از آن) به چاپ نرسیده است و همچنین برای بررسی و چاپ به نشریه دیگری ارسال نشده است. محتوای علمی و ادبی مقاله حاصل فعالیت علمی نویسندگان است.

**تعارض منافع:** نویسندگان این مقاله اعلام می‌کنند که این اثر حاصل پژوهشی مستقل بوده و هیچ‌گونه تضاد منافی با اشخاص یا سازمان‌های دیگر ندارد.



- 32- Hutchinson JW. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proceedings of the Royal Society of London Series A: Mathematical and Physical Sciences* 1976;348(1652):101-127.
- 33- Zhang J, Joshi ShP. Phenomenological crystal plasticity modeling and detailed micromechanical investigations of pure magnesium. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2012;60(5):945-972.
- 34- Tadano Y, Yoshihara Y, Hagihara S. A Crystal plasticity modeling considering volume fraction of deformation twinning. *International Journal of Plasticity*. 2016;84:88-101.
- 35- Yu Q, Zhang J, Jiang Y. Direct observation of twinning-detwinning-retwinning on magnesium single crystal subjected to strain-controlled cyclic tension-compression in [0001] direction. *Philosophical Magazine Letters*. 2011;91(12):757-765.
- 36- Hazeli K, Askari H, Cuadra J, Streller F, Carpick RW, Zhib HM, et al. Microstructure-Sensitive investigation of magnesium alloy fatigue. *International Journal of Plasticity*. 2015;68:55-76.
- 37- Xiong Y, Yu Q, Jiang Y. Multiaxial fatigue of extruded AZ31B magnesium alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2013;546:119-128.
- 38- Belytschko T, Kam Liu W, Moran B, Elkhodary Kh. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. 2<sup>nd</sup> Edition. Hoboken: Wiley; 2014.
- 39- Jackson MA, Groeber MA, Uchic MD, Rowenhorst DJ, Graef MD. H5ebds: An archival data format for electron back-scatter diffraction data sets. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. 2014;3(1):44-55.
- 40- Lv L, Xin Y, Yu H, Hong R, Liu Q. The role of dislocations in strain hardening of an extension twinning predominant deformation. *Materials Science and Engineering: A*. 2015;636:389-395.
- 41- Fan H, Aubry S, Arsenlis A, EL-Awady J. The Role of twinning deformation on the hardening response of polycrystalline magnesium from discrete dislocation dynamics simulation. *Acta Materialia*. 2015;92:126-139.
- 42- Hyuk Park S, Hong S, Yoon J, Soo Lee Ch. Influence of loading direction on the anisotropic fatigue properties of rolled magnesium alloy. *International Journal of Fatigue*. 2016;87:210-215.
- 43- Castro F, Jiang Y. Fatigue of extruded AZ31B magnesium alloy under stress- and strain-controlled conditions including step loading. *Mechanics of Materials*. 2017;108:77-86.
- 44- Xiong Y, Yu Q, Jiang Y. Cyclic deformation ANF fatigue of extruded AZ31B magnesium alloy under different strain ratios. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;649:93-103.
- 45- Roostaei AA, Jahed H. Multiaxial cyclic behavior and fatigue modelling of AM30 magnesium alloy extrusion.
- 46- Xiong Y. Microstructure damage evaluation associated with cyclic deformation for extruded AZ31B magnesium alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;675:171-180.
- 47- McDowell DL, Dunne FPE. Microstructure-Sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *International Journal of Fatigue*. 2010;32(9):1521-1542.
- 48- Dunne FPE. Fatigue crack nucleation: Mechanistic modelling across the length scales. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*. 2014;18(4):170-179.
- 49- Catelluccio G, Musinski WD, McDowell D. Recent developments in assessing microstructure-sensitive early stage fatigue of polycrystals. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*. 2014;18(4):180-187.
- 16- Mayama T, Noda M, Chiba R, Kuroda M. Crystal plasticity analysis of texture development in magnesium alloy during extrusion. *International Journal of Plasticity*. 2011;27(12):1916-1935.
- 17- Fernandez A, Teresa Perez Prado M, Wei Y, Jerusalem A. Continuum modeling of the response of an mg alloy AZ31 rolled sheet during uniaxial deformation. *International Journal of Plasticity*. 2011;27(11):1739-1757.
- 18- Herrera-Solaz V, LLorca J, Dogan E, Karaman I, Segurado J. An inverse optimization strategy to determine single crystal mechanical behavior from polycrystal tests: Application to AZ31 Mg alloy. *Journal of Plasticity*. 2014;57:1-15.
- 19- Kothari M, Anand L. Elasto-Viscoplastic constitutive equations for polycrystalline metals: Application to tantalum. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1998;46(1):51-83.
- 20- Segurado J, Lebensohn RA, LLorca J. Computational homogenization of polycrystals. *Advances in Applied Mechanics*. 2018;51:1-114.
- 21- Matous K, Geers MGD, Kouznetsova VG, Gillman A. A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials. *Journal of Computational Physics*. 2017;330:192-220.
- 22- Hama T, Takuda H. Crystal-Plasticity finite-element analysis of inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet. *International Journal of Plasticity*. 2011;27(7):1072-1092.
- 23- Hama t, Takuda H. Crystal plasticity finite-element simulation of work-hardening behavior in a magnesium alloy sheet under biaxial tension. *Computational Materials Science*. 2012;51(1):156-164.
- 24- Hama T, Kitamura N, Takuda H. Effect of twinning and detwinning on inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet. *Materials Science and Engineering: A*. 2013;583:232-241.
- 25- Hama T, Nagao H, Kuchinomachi Y, Takuda H. Effect of pre-strain on work-hardening behavior of magnesium alloy sheets upon cyclic loading. *Materials Science and Engineering: A*. 2014;591:69-77.
- 26- Hama T, Tanaka Y, Uratani, M, Takuda H. Deformation behavior upon two-step loading in a magnesium alloy sheet. *International Journal of Plasticity*. 2016;82:283-304.
- 27- Yi N, Hama T, Kobuki A, Fujimoto H, Takuda H. Anisotropic deformation behavior under various strain paths in commercially pure titanium grade 1 and grade 2 sheets. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;655:70-85.
- 28- Hama T, Kobuki A, Takuda H. Crystal plasticity finite element analysis of anisotropic deformation behavior in a commercially pure titanium grade 1 sheet. *International Journal of Plasticity*. 2017;91:77-108.
- 29- Hama T, Suzuki T, Hatakeyama Sh, Fujimoto H, Takuda H. Role of twinning on the stress and strain behaviors during reverse loading in rolled magnesium alloy sheets. *Materials Science and Engineering: A*. 2018;725:8-18.
- 30- Wang H, Wu PD, Wang J, Tome CN. A crystal plasticity model for hexagonal close packed (HCP) crystals including twinning and detwinning mechanisms. *International Journal of Plasticity*. 2013;49:36-52.
- 31- Asaro RJ, Needleman A. Overview no. 42 texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metallurgica*. 1985;33(6):923-953.

Crystal Plasticity Modeling and Validated via In Situ Synchrotron XRD and In Situ SEMEBSD. International Journal of Plasticity. 2019;119:43-56.

52- Hong SG, Park SH, Lee ShS. Role of {10-12} twinning characteristics in the deformation behavior of a polycrystalline magnesium alloy. Acta Materialia. 2010;58(18):5873-5885.

50- Wen B, Wang F, Jin L, Dong J. Fatigue damage development in extruded Mg-3Al-Zn magnesium alloy. Material Science and Engineering: A. 2016;667:171-178.

International Journal of Fatigue. 2017;97:150-161.

51- Zhang H, Jérusalem A, Salvati E, Papadaki C, Fong KS, Song X, et al. Multi-Scale Mechanisms of Twinning-Detwinning in Magnesium AZ31B Alloy Simulated by