



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΜΕΤΑΛΛΕΙΩΝ – ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ  
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΜΕΤΑΛΛΟΓΝΩΣΙΑΣ

## Πρόβλεψη κρυσταλλογραφικού ιστού σε κράματα αλουμινίου με τη μέθοδο Crystal Plasticity

Διπλωματική Εργασία

**Μάνθος Κωτσιόπουλος**

Επιβλέπων: Dr. – Ing. Σπύρος Παπαευθυμίου, Αναπληρωτής Καθηγητής

Αθήνα, [Φεβρουάριος, 2022]

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΜΕΤΑΛΛΕΙΩΝ – ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ  
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΜΕΤΑΛΛΟΓΝΩΣΙΑΣ

## Πρόβλεψη κρυσταλλογραφικού ιστού σε κράματα αλουμινίου με τη μέθοδο Crystal Plasticity

Διπλωματική Εργασία

**Μάνθος Κωτσιόπουλος**

Επιβλέπων: Dr. – Ing. Σπύρος Παπαευθυμίου, Αναπληρωτής Καθηγητής

Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή στις / /

Σπ. Παπαευθυμίου, Αν. Καθηγητής .....(Υπογραφή)

Γεώργιος Φούρλαρης, Καθηγητής .....(Υπογραφή)

Δημήτριος Πάνιας, Καθηγητής .....(Υπογραφή)

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή

Copyright © Μάνθος Κωτσιόπουλος

Με επιφύλαξη κάθε δικαιώματος. All rights reserved.

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή



# Περιεχόμενα

---

|  |    |
|--|----|
| Ευχαριστίες.....   | 11 |
| Abstract .....   | 13 |
| Summary.....   | 14 |
| 1 Εισαγωγή .....   | 15 |
| 2 Θεωρητικό υπόβαθρο .....   | 16 |
| 2.1 Το αλουμίνιο και τα κράματα του.....   | 16 |
| 2.1.1 Γενικά χαρακτηριστικά .....  | 16 |
| 2.1.2 Κράματα αλουμινίου .....   | 16 |
| 2.1.3 Φάσεις και μικρογραφικά στοιχεία .....   | 20 |
| 2.1.4 Κρυσταλλογραφικός ιστός .....  | 22 |
| 2.1.5 Διαταραχές .....   | 26 |
| 2.1.6 Υποκόκκοι .....  | 29 |
| 2.1.7 Μέτρο ελαστικότητας και όριο διαρροής.....                                       | 32 |
| 2.2 Προσομοιώσεις μικροδομής .....   | 32 |
| 2.3 Κρυσταλλική πλαστικότητα & μοντελοποίηση αστοχίας .....                            | 34 |
| 2.3.1 Εισαγωγή στα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας.....                             | 34 |
| 2.3.2 Φαινομενολογικό μοντέλο σύστασης κρυσταλλικής πλαστικότητας.....                 | 35 |
| 2.3.3 Μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών .....                   | 37 |
| 2.3.4 Αρχές μοντελοποίησης αστοχίας με την μέθοδο πεδίου φάσης.....                    | 38 |
| 2.3.5 Material Point Model (MPM) .....   | 39 |
| 2.4 Αντιπροσωπευτικό στοιχείο/ κυψελίδα όγκου (Representative Volume Element – RVE) 44 |    |
| 2.5 Εναλλακτικά λογισμικά .....  | 46 |
| 3 Πειραματικό Μέρος .....  | 48 |
| 3.1 Δημιουργία αντιπροσωπευτικού στοιχείου όγκου (RVE) .....                           | 48 |
| 3.1.1 Δημιουργία RVE από αρχείο EBSD .....   | 49 |
| 3.1.2 Δημιουργία RVE από βιβλιογραφικά δεδομένα (5XXX).....                            | 51 |
| 3.2 Παράμετροι υλικών .....  | 63 |
| 3.2.1 Νόμοι και παράμετροι ελαστικής παραμόρφωσης .....                                | 63 |
| 3.3 Παράμετροι και συνθήκες προσομοιώσεων.....   | 64 |
| 3.3.1 Συνθήκες φορτίου .....   | 64 |
| 3.3.2 Συνθήκες θερμοκρασίας και καταστροφής .....                                      | 65 |
| 4 Διεξαγωγή προσομοιώσεων & Προετοιμασία αποτελεσμάτων.....                            | 66 |
| 5 Αποτελέσματα & Συζήτηση επί των αποτελεσμάτων .....                                  | 67 |
| 5.1 Παρουσίαση και σχολιασμός αποτελεσμάτων και περιπτωσιολογικής μελέτης... 67        |    |
| 6 Συμπεράσματα .....   | 88 |

|     |                                     |    |
|-----|-------------------------------------|----|
| 6.1 | Συμπεράσματα μελέτης .....          | 88 |
| 6.2 | Προτάσεις για περαιτέρω έρευνα..... | 89 |
| 7   | Ευρετήριο .....                     | 90 |
| 7.1 | Κατάλογος εικόνων .....             | 90 |
| 7.2 | Κατάλογος πινάκων.....              | 93 |
| 7.3 | Κατάλογος εξισώσεων.....            | 93 |
| 8   | Βιβλιογραφία.....                   | 95 |

## Ευχαριστίες

---

Η παρούσα διπλωματική εργασία αποτελεί μία συνέργεια μεταξύ του Ε.Μ.Π. και του προσωπικού της εταιρείας ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. Χωρίς τη συνεργασία των δύο αυτών φορέων η ολοκλήρωση της εργασίας δεν θα ήταν εφικτή.

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υπεύθυνο καθηγητή μου Αν. Καθ. Dr.-Ing. Σπύρο Παπαευθυμίου ο οποίος από την πρώτη ημέρα στη Σχολή, μου έδειξε εμπιστοσύνη και μου έδωσε αμέτρητες ευκαιρίες και προκλήσεις που συνέβαλαν τόσο στην προσωπική όσο και επαγγελματική εξέλιξη μου. Τον ευχαριστώ επίσης για την αμέριστη συμπαράσταση και κατανόηση που μου έχει δείξει τα τελευταία χρόνια και για την επιστημονική καθοδήγηση κατά τη διάρκεια συγγραφής της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα Βασίλη Λουκαδάκη για τον προσωπικό χρόνο και την προσπάθεια που έχει καταβάλει προκειμένου να με καθοδηγήσει και να μου επιλύσει απορίες κατά τη διάρκεια των σπουδών μου και της συγγραφής της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω τη διοίκηση της ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. για τη φιλοξενία κατά τη διάρκεια της πρακτικής άσκησης ΙΙ, όπου μου δόθηκε η ευκαιρία να έρθω σε επαφή με τον κλάδο της εφαρμοσμένης υπολογιστικής μηχανικής υλικών. Θα ήθελα ακόμα να ευχαριστήσω τον Δρ. Ευάγγελο Γαβαλά της ΕΛΒΑΛ Α.Ε. για την υποστήριξη του στα πρώτα βήματα της επαφής μου με τον κλάδο και τη Σοφία Παπαδοπούλου της ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. για την χορήγηση των πειραματικών δεδομένων και των πληροφοριών που περιλαμβάνονται στην παρούσα διπλωματική εργασία.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου που με στήριξε και στηρίζει όλα τα χρόνια των σπουδών προσφέροντας τη δυνατότητα να ανακαλύψω και να ενασχοληθώ με τα ενδιαφέροντα μου και να εκμεταλλευτώ τις ευκαιρίες που μου παρουσιάστηκαν.

Η διπλωματική μου εργασία αφιερώνεται στον Παππού μου ο οποίος με υποστήριξε σε όλες τις προσωπικές, πνευματικές και επαγγελματικές φιλοδοξίες μου και δυστυχώς δεν πρόλαβε να τη δει ολοκληρωμένη όπως όλοι ελπίζαμε.

Αυτή η σελίδα έχει μείνει εσκεμμένα λευκή

## Abstract

---

Το θέμα της πρόβλεψης του κρυσταλλογραφικού ιστού και των μηχανικών ιδιοτήτων εξετάζεται στην παρούσα εργασία μέσω υπολογιστικών προσομοιώσεων κρυσταλλικής πλαστικότητας με χρήση μετασχηματισμών Fourier. Συγκεκριμένα, παρουσιάζεται αρχικά το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο για την κατανόηση της δομής, παραμόρφωσης και καταστροφής των μεταλλικών υλικών και εξειδικεύεται για κράματα αλουμινίου της σειράς 5XXX. Ακολουθεί εισαγωγή στον κλάδο της υπολογιστικής μηχανικής υλικών (Integrated Computational Material Engineering - ICME) και αναλύεται με ποιο τρόπο οι τεχνικές του κλάδου μπορούν να προβλέψουν τις μηχανικές ιδιότητες ενός κράματος αλουμινίου 5XXX μέσω ενός αντιπροσωπευτικού όγκου (RVE) κάνοντας χρήση μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας. Έπειτα, προτείνεται μία μεθοδολογία δημιουργίας RVE τόσο από πειραματικά δεδομένα EBSD-SEM όσο και από βιβλιογραφικά ενώ αναλύονται και οι παράμετροι των συμμετεχόντων υλικών και οι παράμετροι διεξαγωγής της τελικής προσομοίωσης. Τέλος, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα μαζί με μία περιπτωσιολογική μελέτη και σχολιάζονται οι παρατηρούμενες μεταβολές στο σχήμα του εξεταζόμενου RVE, οι ανεπτυγμένες τάσεις μεταξύ των κόκκων, οι τάσεις μεταβολής του κρυσταλλογραφικού ιστού και, όπου είναι εφικτό, η πρόβλεψη μηχανικών ιδιοτήτων.

## Summary

---

The subject of the prediction of crystallographic texture and mechanical properties is addressed in the present work by means of computer simulations of crystalline plasticity using Fourier transforms. Initially, the necessary theoretical background for understanding the structure, deformation and destruction of metallic materials is presented and is later adapted for 5XXX series aluminium alloys. An introduction of the field of Integrated Computational Material Engineering (ICME) follows and how its techniques can predict the mechanical properties of a 5XXX alloy through a representative volume (RVE) using crystal plasticity models. Next, a methodology for generating said RVE from both EBSD-SEM experimental data and literature is presented, while the parameters of the participating materials and the parameters of the final simulation are analysed. Finally, the results are presented alongside with a case study and the observed changes in the shape of the selected RVE, the developed stresses amongst the grains, the changes in the crystallographic texture and, where possible, the prediction of mechanical properties are presented.

# 1 Εισαγωγή

---

Η μελέτη αυτή έχει ως σκοπό την αναζήτηση και επικύρωση μεθοδολογίας, για την προσομοίωση μηχανικών δοκιμών σε μεταλλικά υλικά με στόχο την πρόβλεψη του κρυσταλλογραφικού αναπτυσσόμενου προσανατολισμού επιτρέποντας την εξαγωγή ποσοτικών και πειραματικών αποτελεσμάτων για διάφορα σχετικά μεγέθη. Στόχος είναι η παρουσίαση μεθόδων που ενσωματώνουν τόσο πειραματικά όσο και βιβλιογραφικά δεδομένα προκειμένου να υποστηρίξουν τον ερευνητή, μειώνοντας το χρόνο και τους απαραίτητους πόρους της διαδικασίας αναζήτησης, μελέτης και ελέγχου ποιότητας μεταλλικών κραμάτων.

Η παρούσα εργασία, δεν αποσκοπεί στην εύρεση μεθόδου που αντικαθιστά τις εργαστηριακές δοκιμές και πειράματα. Αντ' αυτού, αποσκοπεί στην υποστήριξη του ερευνητή και του μηχανικού, προκειμένου να μειωθεί η τέλεση αυτών και να αφιερωθούν οι διαθέσιμοι πόροι στην επιβεβαίωση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων. Με αυτόν τον τρόπο υπάρχει η δυνατότητα ψηφιακού πειραματισμού μέσω του κλάδου της Υπολογιστικής Μηχανικής Υλικών (Integrated Computational Material Engineering – ICME) ο οποίος υποστηρίζεται πλέον από κορυφαία ερευνητικά και βιομηχανικά ιδρύματα, όπως αναλύεται στην εργασία.

Τέλος, σημειώνεται ότι η πανδημία COVID-19, η οποία κατέστησε τη διενέργεια πειραματικών δοκιμών και διεργασιών δύσκολη ή και αδύνατη, ανέδειξε την σημασία εφαρμογής τέτοιων μεθόδων. Το γεγονός αυτό επηρέασε σημαντικά και την εξέλιξη της παρούσας εργασίας, καθώς δεν ήταν δυνατή η διενέργεια όλων των προγραμματισμένων εργαστηριακών δοκιμών και η επικύρωση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με πειραματικά. Όπου αυτό συνέβη, σημειώνεται στο αντίστοιχο κεφάλαιο.

## 2 Θεωρητικό υπόβαθρο

---

### 2.1 Το αλουμίνιο και τα κράματα του

Το αργίλιο (Al) ή αλουμίνιο, είναι το τρίτο πιο κοινό στοιχείο της γης μετά το οξυγόνο (O) και το πυρίτιο (Si) και αποτελεί το 8% του φλοιού της γης. Είναι μάλιστα ένα από τα πιο κοινά στοιχεία σε ευρέως χρησιμοποιούμενα κράματα με πάνω από 400 εκ. τόνους σε χρήση παγκοσμίως [1]. Το γεγονός αυτό δεν είναι τυχαίο καθώς το αλουμίνιο ανακυκλώνεται εύκολα με πάνω από 75% της παγκόσμιας παραγωγής να βρίσκεται ακόμα σε χρήση καθώς για την ανακύκλωση του απαιτείται μόλις 5% της ενέργειας που απαιτείται για την πρωτογενή παραγωγή του [1]–[3].

#### 2.1.1 Γενικά χαρακτηριστικά

Η επιλογή του αλουμινίου σε διάφορες εφαρμογές οφείλεται στο τρίπτυχο πλεονεκτημάτων που το διέπουν. Συγκεκριμένα, είναι σημαντικά ελαφρύτερο από το σίδηρο αλλά έχει παρόμοιες αντοχές με υψηλή αναλογία αντοχής προς βάρος. Επιπλέον, είναι ελατό και έχει καλή επιδεκτικότητα διαμόρφωσης λόγω του συστήματος κρυστάλλωσης [2]. Συνεπώς, το αλουμίνιο μπορεί να διαμορφωθεί εν θερμώ ή εν ψυχρώ με όλες τις συνήθεις τεχνικές ενώ δεν είναι τοξικό σε αντίθεση με τα πλαστικά. Τέλος, δεν οξειδώνεται εις βάθος, καθώς στην επιφάνειά του παράγεται ένα λεπτό και αδιαπέραστο στρώμα αργλικού οξειδίου [1], [2].

Επιπλέον, το αλουμίνιο θεωρείται άριστος αγωγός θερμότητας και ηλεκτρισμού με αντιστοιχία αγωγιμότητας με το χαλκό περίπου στο 60% και λόγω του σημαντικά μειωμένου ειδικού του βάρους χρησιμοποιείται και αυτό, όπως και ο χαλκός, ευρέως για τη μεταφορά ηλεκτρισμού [2].

Το αλουμίνιο είναι κρυσταλλικό και κρυσταλλώνεται στο κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα (Face Centered Cubic) [4].

#### 2.1.2 Κράματα αλουμινίου

Η ευρεία χρήση του αλουμινίου σε διάφορες εφαρμογές έχει οδηγήσει στη δημιουργία εκατοντάδων κραμάτων, τα οποία χωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες: τα κράματα διαμόρφωσης και τα κράματα χύτευσης. Η πρώτη κατηγορία



ομαδοποιείται σύμφωνα με το σύστημα της Ένωσης Αλουμινίου. Για τη δεύτερη κατηγορία χρησιμοποιείται ένα παρόμοιο σύστημα της ένωσης αλουμινίου σύμφωνα με το σύστημα ANSI H35.1(M)-1997 [5], [6].

Συγκεκριμένα, η κατηγορία των κραμάτων διαμόρφωσης χωρίζεται σε 9 υποκατηγορίες, όπως φαίνεται στην παρακάτω λίστα, οι οποίες κωδικοποιούνται με ένα τετραψήφιο αριθμό. Ο πρώτος αριθμός αφορά τα περιεχόμενα κραματικά στοιχεία, ο δεύτερος αφορά τα όρια περιεκτικότητας ακαθαρσιών και ο τρίτος και ο τέταρτος αφορούν τον ειδικό τύπο κράματος [7].

- 1XXX: Καθαρό αλουμίνιο χωρίς κραματικές προσμίξεις – Χρησιμοποιείται στην ηλεκτρική και χημική βιομηχανία
- 2XXX: Κράματα αλουμινίου-χαλκού με προσθήκες επιπλέον κραματικών στοιχείων όπως το μαγνήσιο – Χρησιμοποιούνται στην αεροβιομηχανία
- 3XXX: Κράματα αλουμινίου-μαγνανίου – Χρησιμοποιούνται σε αρχιτεκτονικές εφαρμογές
- 4XXX: Κράματα αλουμινίου-πυριτίου – Χρησιμοποιούνται σε αναλώσιμα συγκολλήσεων
- 5XXX: Κράματα αλουμινίου-μαγνησίου – Χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές που εκτίθενται σε θαλάσσια περιβάλλοντα όπως σε γάστρες πλοίων
- 6XXX: Κράματα αλουμινίου-μαγνησίου-πυριτίου – Χρησιμοποιούνται στην αυτοκινητοβιομηχανία και για αρχιτεκτονικές εφαρμογές
- 7XXX: Κράματα αλουμινίου-ψευδαργύρου – Χρησιμοποιούνται για εξαρτήματα αεροπλάνων καθώς έχουν τη μεγαλύτερη αντοχή από τις οικογένειες κραμάτων αλουμινίου
- 8XXX: Κράματα αλουμινίου-άλλων στοιχείων όπως λίθιο ή σίδηρο
- 9XXX: Δεσμευμένη ονομασία για μελλοντική χρήση

Από τις παραπάνω σειρές τα κράματα των 2XXX, 6XXX, 7XXX και μερικά κράματα της 8XXX είναι επιδεκτικά σε σκλήρωση μέσω θερμικής κατεργασίας δεδομένου ότι είναι κυρίως μονοφασικά [5], [7].

Αντίστοιχα με την κατηγορία των κραμάτων διαμόρφωσης, η κατηγορία των χυτών κραμάτων κωδικοποιείται σε 9 υποκατηγορίες με έναν επίσης τετραψήφιο αριθμό

στον οποίο μεσολαβεί μία τελεία ανάμεσα στο τρίτο και τέταρτο ψηφίο όπως φαίνεται στην παρακάτω λίστα [5]. Ο πρώτος αριθμός αφορά και πάλι το κύριο κραματικό στοιχείο, ο δεύτερος και ο τρίτος την κατηγορία του υλικού και ο τελευταίος αφορά τη μορφή χυτού με την τιμή 0 να συμβολίζει τελικό χυτό και την τιμή 1 να συμβολίζει πλίνθωμα [7].

- 1XX.X Καθαρό αλουμίνιο χωρίς κραματικές προσμίξεις – Χρησιμοποιείται για την κατασκευή ελίκων
- 2XX.X Κράματα αλουμινίου-χαλκού
- 3XX.X Κράματα αλουμινίου-πυριτίου όπου σημειώνονται και οι προσμίξεις άλλων κραματικών στοιχείων όπως χαλκού ή μαγνησίου. Αποτελούν το 90% των χυτών κραμάτων αλουμινίου
- 4XX.X Κράματα αλουμινίου-πυριτίου
- 5XX.X Κράματα αλουμινίου-μαγνησίου
- 6XX.X Δεν χρησιμοποιούνται
- 7XX.X Κράματα αλουμινίου-ψευδαργύρου όπου σημειώνονται και οι προσμίξεις άλλων κραματικών στοιχείων όπως χαλκού ή μαγνησίου
- 8XX.X Κράματα αλουμινίου-κασσίτερου
- 9XX.X Δεν χρησιμοποιούνται

Από τις παραπάνω σειρές τα κράματα των 2XX, 3XX και 7XX είναι επιδεκτικά σε σκλήρωση μέσω θερμικής κατεργασίας [5].

Επιπλέον των παραπάνω συστημάτων ταξινόμησης, τα κράματα μπορούν να χαρακτηριστούν και από έναν ακόμα κωδικό, που αποτελείται από ένα γράμμα και ορισμένα ψηφία, τα οποία προσαρτώνται στο τέλος του κωδικού του κράματος, όπως φαίνεται στην παρακάτω λίστα [8].

- Γράμμα F: Δεν έχει επέλθει κάποια περαιτέρω επεξεργασία. Το προϊόν είναι όπως κατασκευάστηκε.
- Γράμμα O: Το κράμα έχει υποστεί ανόπτηση προκειμένου να βελτιστοποιηθεί η ολκιμότητα.
- Γράμμα H: Το κράμα έχει υποστεί εργοσκλήρυνση και πιθανά κάποια μετέπειτα θερμική κατεργασία προκειμένου να αυξηθεί η αντοχή και η

σκληρότητα του κράματος. Πάντα ακολουθείται από δύο ψηφία, τα οποία υποδηλώνουν τις διάφορες επιμέρους κατεργασίες.

- Γράμμα W: Το κράμα έχει υποστεί θερμική επεξεργασία διαλύματος. Έχει εφαρμογή μόνο σε συγκεκριμένα κράματα που υπόκεινται γήρανση στιγμιαία σε θερμοκρασία δωματίου.
- Γράμμα T: Το κράμα έχει υποστεί θερμική επεξεργασία. Ακολουθείται από 3 επιπλέον ψηφία με το πρώτο να περιγράφει τη θερμική κατεργασία, γήρανση και μηχανική κατεργασία και, το δεύτερο, να λαμβάνει τιμές 51 ή 52 και να περιγράφει την αποτατική διαδικασία [8].

Το δείγμα, που μελετήθηκε στην παρούσα εργασία είναι κράματος AA5182 – O, το οποίο έχει υποστεί ψυχρή έλαση με υποβιβασμό 90% και, έπειτα, ανακρυστάλλωση. Το δείγμα παραχωρήθηκε από την εταιρεία ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. για αποκλειστικά εκπαιδευτικούς σκοπούς.

|     | Al   | Mg | Mn  | Fe   | Zn   | Si  | Cu   | Cr  | Ti  |
|-----|------|----|-----|------|------|-----|------|-----|-----|
| Από | 93,2 | 4  | 0,2 | 0    | 0    | 0   | 0    | 0   | 0   |
| Έως | 95,8 | 5  | 0,5 | 0,35 | 0,25 | 0,2 | 0,15 | 0,1 | 0,1 |

Πίνακας 1. Σύνθεση κράματος 5182 με περιεκτικότητα στοιχείων % κατά βάρος [9]

Από τα παραπάνω, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν το Μαγνήσιο (Mg) και το Πυρίτιο (Si). Η χρήση Μαγνησίου στοχεύει στη σκλήρυνση μέσω στερεού διαλύματος, καθώς το συγκεκριμένο κράμα δεν επιδέχεται σκλήρωση με κατακρήμνιση. [10] Προστίθεται, επίσης, προκειμένου να αυξήσει την αντοχή, χωρίς όμως παράλληλα να επηρεάζει την ολκιμότητα [10], [11].

Το Πυρίτιο προστίθεται, καθώς βελτιώνει την επιδεκτικότητα κατεργασίας του κράματος, ενώ παράλληλα αυξάνει και την αντοχή του [10].

Οι τυπικές μηχανικές ιδιότητες του κράματος παρουσιάζονται στον ακόλουθο πίνακα:

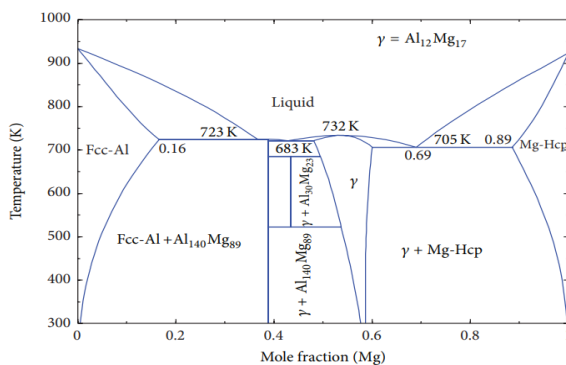
|  |             |
|--|-------------|
| Μέτρο ελαστικότητας                                    | 68 GPa      |
| Παραμόρφωση θραύσης                                    | 1,1-12%     |
| Λόγος Poisson  | 0,33        |
| Τάση διαρροής (Εξαρτάται από την περαιτέρω κατεργασία) | 130-360 MPa |

Πίνακας 2. Μηχανικές ιδιότητες κράματος 5182 [9]

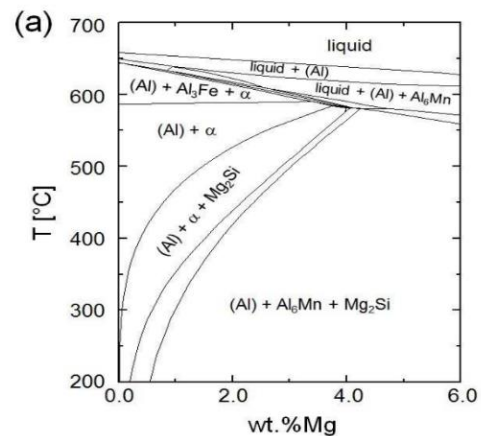
### 2.1.3 Φάσεις και μικρογραφικά στοιχεία

Το κράμα AA5182 είναι πολυφασικό λόγω της σχηματιζόμενης β-φάσης με το Μαγνησίου (προσθήκη Mg 4-5%). Συγκεκριμένα, κατά τη διάρκεια της απόψυξης σε θερμοκρασία δωματίου, το υπέρκορο στερεό διάλυμα μετασχηματίζεται σε αρχικά ζώνες Guinier–Preston (GP Zones) και έπειτα σε β'', β' και τέλος την ευμεγέθη β φάση ισορροπίας [14]. Οι FCC β φάσεις  $Al_3Mg_2$  είναι επιθυμητές, καθώς εμφανίζονται ως κατακρημνίσματα, τα οποία προσδίδουν αντοχή, αλλά η εμφάνισή τους απαιτεί διάστημα παραμονής σε εύρος θερμοκρασίας 50-200°C [14], [15].

Αναμένονται και άλλες ευμεγέθεις ενδομεταλλικές φάσεις, όπως φαίνεται παρακάτω με κύρια την  $Mg_2Si$  [13].



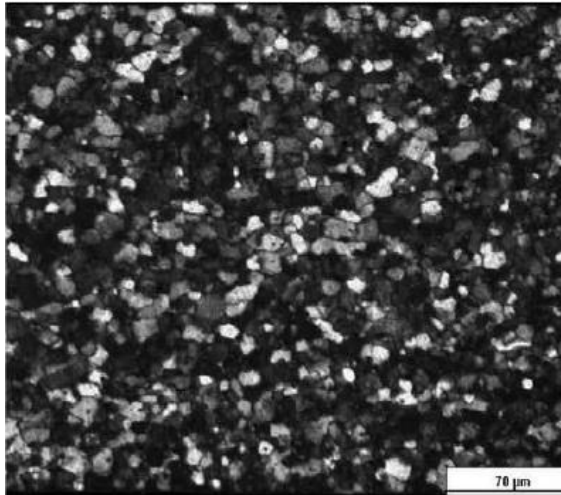
Εικόνα 1. Διάγραμμα φάσεων Al-Mg [12]



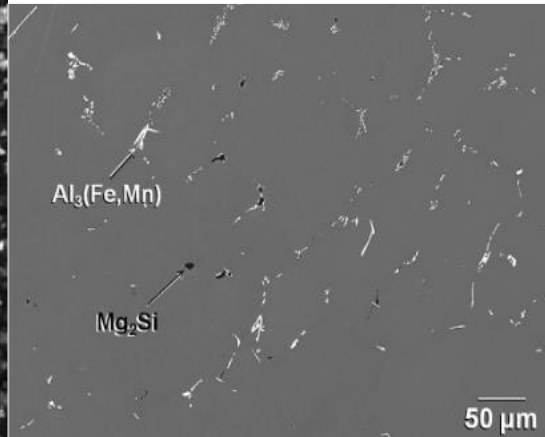
Εικόνα 2. Διάγραμμα φάσεων συστήματος Al-Mg-Mn-Fe-Si για 0,3% Mn, 0,25% Fe και 0,14% Si

[13]

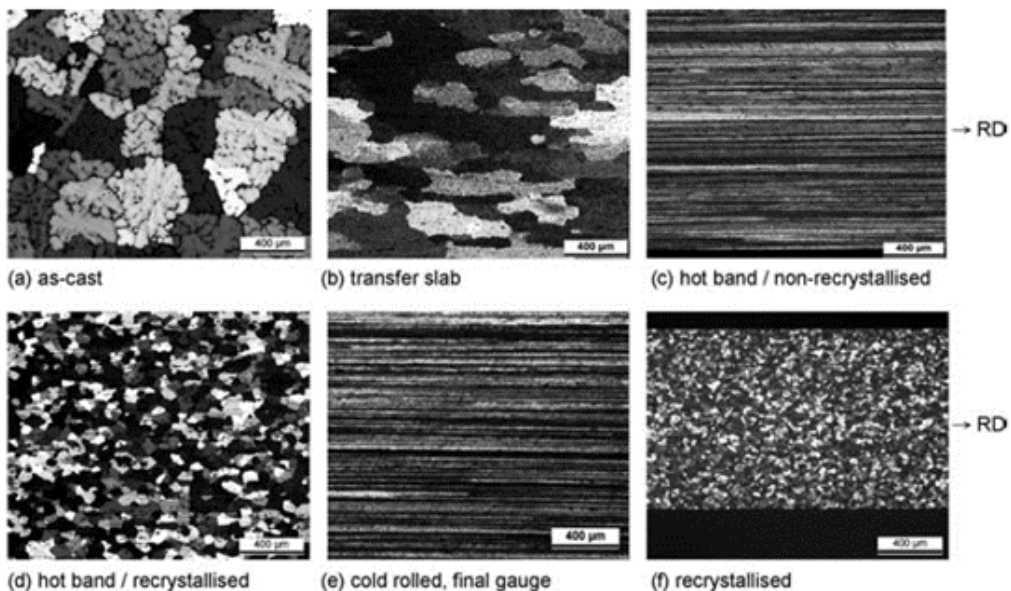
Η μικροδομή εξαρτάται, επίσης, από το στάδιο της κατεργασίας της έλασης, που εφαρμόζεται στο κράμα και καταλήγει, μετά την ανακρυστάλλωση, σε περίπου ισαξονικούς κόκκους [16].



Εικόνα 3. Μικροδομή ψυχρής έλασης AA5182 με υποβιβασμό 90% και ανόπτηση στους 589K για 3 ώρες [16]



Εικόνα 4. Φάσεις ανοπτημένου κράματος AA5182 [13]



Εικόνα 5. Μεταβολές στην μορφολογία της μικροδομής κατά τη διεργασία της έλασης (θερμής και ψυχρής) [17]

#### 2.1.4 Κρυσταλλογραφικός ιστός

Ως κρυσταλλογραφικός ιστός ορίζεται ο προτιμητέος προσανατολισμός των κόκκων. Αυτός διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στη συμπεριφορά του υλικού σε μετέπειτα διεργασίες και, εν τέλει, στις ιδιότητες του. Μπορεί να παρατηρηθεί και να μετρηθεί με μεθόδους ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης (SEM), ενώ για τον προσδιορισμό της β-φάσης, η οποία συχνά βρίσκεται σε μέγεθος μερικών νανομέτρων απαιτείται μελέτη σε ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διερχόμενης δέσμης (TEM) [18].

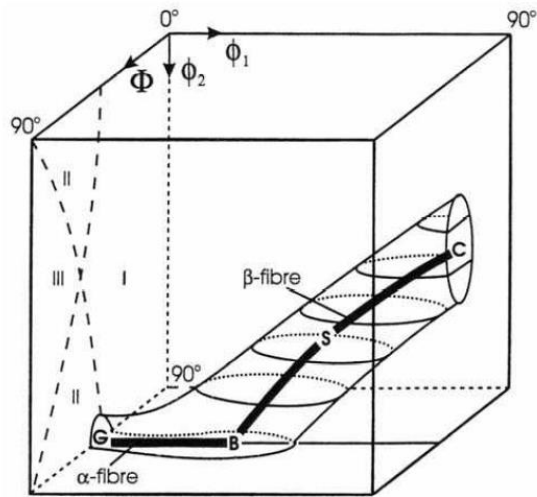
Κατά τη διαδικασία της έλασης παρατηρείται εξέλιξη του κρυσταλλογραφικού προσανατολισμού, η οποία εξαρτάται από τα συστήματα ολίσθησης. Ο ιδιαίτερος προσανατολισμός, που επιτυγχάνεται ονομάζεται κρυσταλλογραφικός ιστός έλασης πριν την ανακρυστάλλωση.

Κατά τη διάρκεια της διαδικασίας της έλασης παρατηρούνται αρκετά βασικά συστατικά κρυσταλλογραφικού ιστού [17]. Στην περίπτωση της ψυχρής έλασης παρατηρούνται 3 βασικά συστατικά, τα οποία περιγράφονται στον πίνακα 3 με σειρά εμφάνισης από κάτω προς τα επάνω.

| Κρυσταλλογραφικό<br>συστατικό | Ενδεικτικοί δείκτες Miller |             | Τυπικές γωνίες Euler<br>(μοίρες) |        |          |
|-------------------------------|----------------------------|-------------|----------------------------------|--------|----------|
|                               | Επιπέδων                   | Διευθύνσεων | $\phi_1$                         | $\Phi$ | $\phi_2$ |
| Copper (Cu)                   | {112}                      | <111>       | 90                               | 30     | 45       |
| S                             | {123}                      | <634>       | 59                               | 34     | 65       |
| Brass (Bs)                    | {011}                      | <211>       | 35                               | 45     | 0/90     |
| G                             | {011}                      | <011>       | 0                                | 45     | 0        |

Πίνακας 3. Κρυσταλλογραφικά συστατικά αλουμινίου έλασης [17], [19]

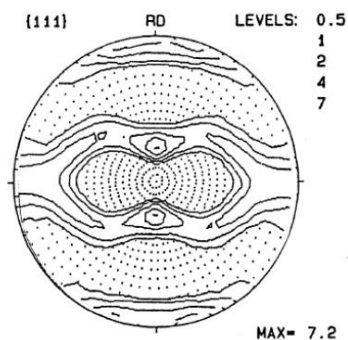
Συγκεκριμένα, για υποβιβασμούς ψυχρής έλασης σε ποσοστό άνω του 50%, και ανάλογα με την αρχική δομή, παρατηρείται η επονομαζόμενη β-ίνα, στην οποία εντοπίζεται αρχικά ο προσανατολισμός Bs, έπειτα ο S και τέλος ο Cu [19]. Η τελική παρουσία των προσανατολισμών αυτών κατά μήκος της β-ίνας δεν είναι σταθερή και εξαρτάται από την προΐστορία του κράματος [17].



Εικόνα 6. Βασικά συστατικά του ιστού έλασης συστήματος FCC σε τρισδιάστατο Euler χώρο [19]

Ο προσανατολισμός S δεν είναι ιδιαίτερα σταθερός, καθώς εμφανίζεται στα αρχικά στάδια της παραμόρφωσης ως συγκέντρωση προσανατολισμών, που μετατρέπονται σε C μέχρι και την ολοκλήρωση της διεργασίας.

Εν τέλει, κατά τη διάρκεια της έλασης, σε κρυσταλλογραφικό σύστημα FCC παρατηρούνται προσανατολισμοί  $\pm 35^\circ$  γύρω από τον άξονα  $\langle 110 \rangle$  με κλίση μέχρι και  $60^\circ$  από τον αρχικό άξονα προς τον άξονα έλασης, οι οποίοι εμφανίζονται κατά μήκος της β-ίνας [19]. Στην εικόνα 7 παρουσιάζονται οι τυπικές πολικές συντεταγμένες  $\{111\}$  AA5182 ψυχρής έλασης και παρατηρείται έντονη παρουσία ιστού.



Εικόνα 7. Πολικό διάγραμμα  $\{111\}$  AA5182 ψυχρής έλασης [19]

Ωστόσο, σε βιομηχανικές εφαρμογές η παραγωγή ελασμάτων αλουμινίου, όπως είναι το εξεταζόμενο δείγμα, ακολουθείται από τη διαδικασία της ανόπτησης. Στόχος είναι η ανακρυστάλλωση, όπου τα όρια κόκκων μεγάλης γωνίας (High Angle Grain Boundaries) μετακινούνται και σχηματίζονται νέοι κόκκοι, χωρίς διαταραχές (οι διαταραχές αναλύονται σε ακόλουθο κεφάλαιο) [20]. Ως αποτέλεσμα, σχηματίζεται μία τυπική κυβική δομή Cube, που είναι χαρακτηριστική των ελασμάτων αλουμινίου και η οποία προσδίδει αντοχή [19].

| Κρυσταλλογραφικό<br>συστατικό | Ενδεικτικοί δείκτες Miller |             | Τυπικές γωνίες Euler<br>(μοίρες) |        |          |
|-------------------------------|----------------------------|-------------|----------------------------------|--------|----------|
|                               | Επιπέδων                   | Διευθύνσεων | $\phi_1$                         | $\Phi$ | $\phi_2$ |
| Cube                          | {001}                      | <100>       | 0                                | 0      | 0/90     |

Πίνακας 4. Κρυσταλλογραφικά συστατικά αλουμινίου έλασης [17], [19]

Η δομή αυτή δεν δημιουργείται εκ νέου. Αντιθέτως, προϋπάρχει στο προεπεξεργασίας πλίνθωμα και κατά τη διάρκεια της διεργασίας επεκτείνεται [19]. Συγκεκριμένα, λόγω της διάτμησης κατά τη διάρκεια της έλασης, προϋπάρχοντες κόκκοι αποκτούν προσανατολισμό τύπου cube καθώς επιμηκύνονται. Ως αποτέλεσμα παρατηρείται καλύτερη χωρική διάταξη, που έπειτα ευνοεί την ανάπτυξη τους κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης στο παραμορφωμένο πλέγμα. Όσο πιο έντονο είναι το φαινόμενο της ανακρυστάλλωσης, τόσο πιο έντονος είναι ο μετασχηματισμός της β-ίνας σε κυβικό ιστό ή και σε RCube [19]. Φυσικά, στον τελικό ιστό υπάρχει και έντονη παρουσία τυχαίων προσανατολισμών ανακρυστάλλωσης και παρουσία β-ίνας, καθώς προσδίδει αντοχή στο αλουμίνιο ψυχρής έλασης [19].

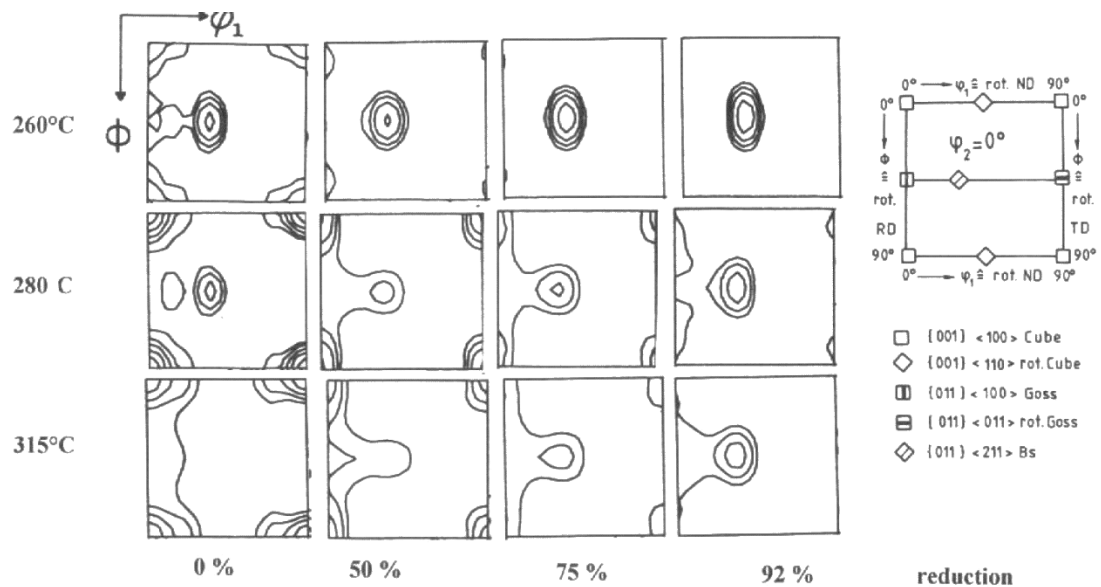
Σε γενικές γραμμές, σε αλουμίνια έλασης, υπάρχουν τέσσερα βασικά σημεία πυρηνοποίησης: [17]

- Ζώνες cube ιστού
- Ζώνες διάτμησης
- Όρια κόκκων
- Ζώνες παραμόρφωσης γύρω από ευμεγέθη σωματίδια

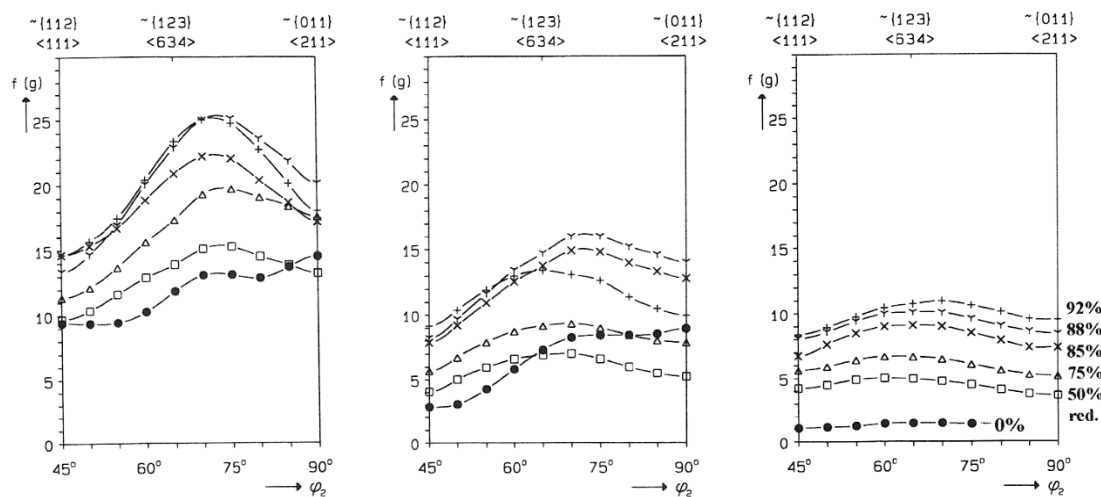


Ανάλογα με το επικρατέστερο σημείο πυρηνοποίησης, επικρατεί και ο αντίστοιχος κρυσταλλικός ιστός κατά τη διάρκεια της ανακρυστάλλωσης [17].

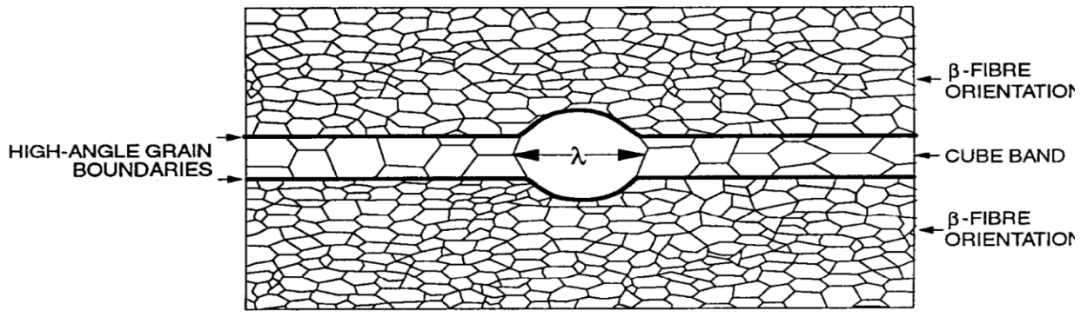
Στην ακόλουθη εικόνα παρουσιάζεται η εξέλιξη του ιστού για διάφορες συνθήκες υποβιβασμού.



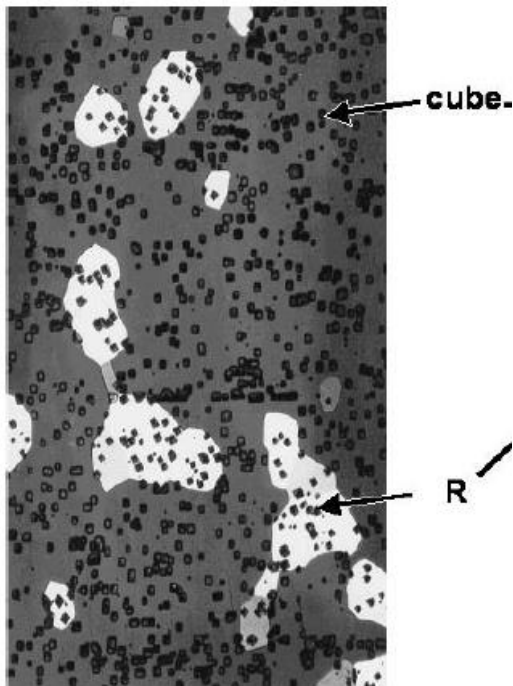
Εικόνα 8. Εξέλιξη ιστού κατά την ψυχρή έλαση  $AlMg_1Mn_1$  [19]



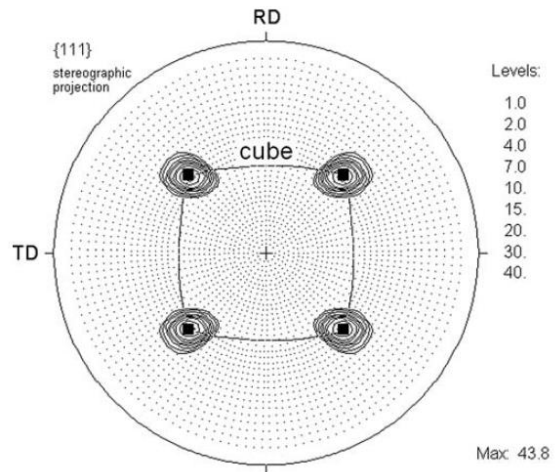
Εικόνα 9. Ένταση  $\beta$ -ίνας ψυχρώς ελασμένου  $AlMg_1Mn_1$  για ανόπτηση σε  $T_{hr} = 260$ , 280 και 315°C αντίστοιχα [19]



Εικόνα 10. Ανάπτυξη Cube σε ιστό β-ίνας [21]



Εικόνα 11. Απεικόνιση R και Cube ιστού [17]

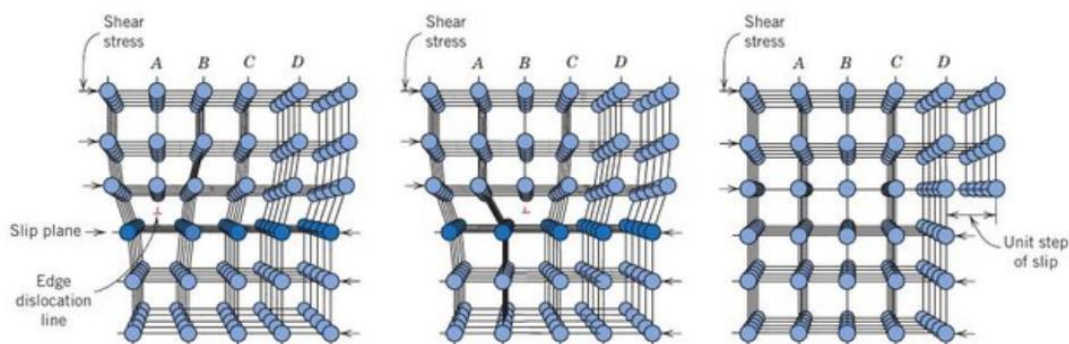


Εικόνα 12. Πολικό διάγραμμα {111}, όπου παρατηρείται ο έντονος κυβικός ιστός [17]

### 2.1.5 Διαταραχές

Οι διαταραχές αποτελούν ένα ελάττωμα στο κρυσταλλικό πλέγμα των μετάλλων. Συγκεκριμένα, μερικά άτομα απουσιάζουν από κάποιο κρυσταλλικό επίπεδο με αποτέλεσμα τα γειτονικά επίπεδα να μετατοπίζονται ελαφρώς προκειμένου να αντισταθμίσουν τις τάσεις [22].

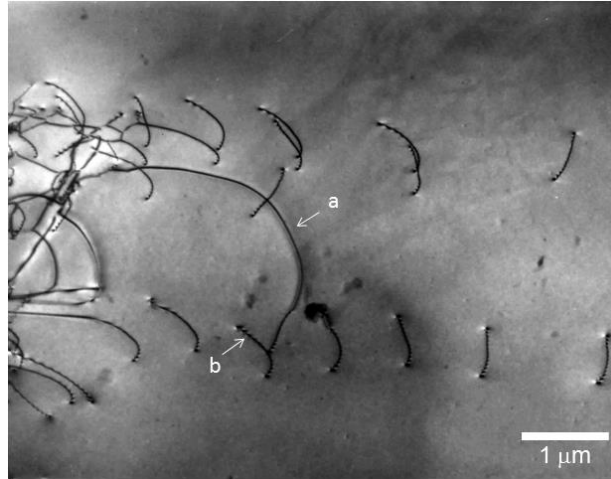
Υπάρχουν δύο είδη διαταραχών: οι διαταραχές ακμής και οι κοχλιωτές διαταραχές. Η διαφορά τους έγκειται στο γεγονός ότι οι διαταραχές ακμής προκαλούν παραμόρφωση στο κρυσταλλικό πλέγμα σε άξονα παράλληλο με τον άξονα της διατμητικής τάσης, ενώ οι κοχλιωτές διαταραχές σε κάθετο άξονα με τον άξονα της διατμητικής τάσης [22].



Εικόνα 13. Διαταραχές ακμής [23]

Συνήθως παράγονται κατά τις διεργασίες που επιφέρουν τη δημιουργία ορίων κόκκων ή όταν αλληλοεπιδρούν φάσεις στα αρχικά στάδια της πλαστικής παραμόρφωσης, όπως η διεργασία της έλασης και, με την πάροδο της διεργασίας, πυκνώνουν [22]. Η παρουσία τους δημιουργεί ένα τοπικό πεδίο παραμόρφωσης, που καθιστά τη διάτμηση του κρυσταλλικού πλέγματος ευκολότερη [24].

Η μετακίνησή τους είναι εφικτή, καθώς οι διαταραχές είναι μικρές συγκριτικά με το μέγεθος του κόκκου και, έτσι, μπορούν να μετακινηθούν σταδιακά. Η κίνησή τους όμως περιορίζεται από τα όριά τους. Ως αποτέλεσμα, όσο πιο λεπτομερής η κατανομή των κόκκων, τόσο πιο δύσκολη η μετακίνησή τους και, κατά συνέπεια, η πλαστική παραμόρφωση του υλικού [22].



Εικόνα 14. Διαταραχές ορατές με TEM. Το βέλος a απεικονίζει γραμμή διαταραχής παράλληλη στην επιφάνεια του δείγματος, ενώ το b απεικονίζει γραμμή διαταραχής λοξή προς το δείγμα [25]

Οι διαταραχές έχουν δύο βασικά μεγέθη, που τις χαρακτηρίζουν. Την ταχύτητα διάδοσης και την πυκνότητα διαταραχών [26]. Το πρώτο δίνεται από την εξίσωση 1:

$$u = v_D \cdot l_g \cdot B_\alpha \cdot e^{-\frac{U_\alpha}{k \cdot T}} \cdot 2 \sinh h \cdot \frac{F \cdot l_\alpha \cdot b}{k \cdot T}$$

Εξίσωση 1. Ταχύτητα μετακίνησης διαταραχών [26]

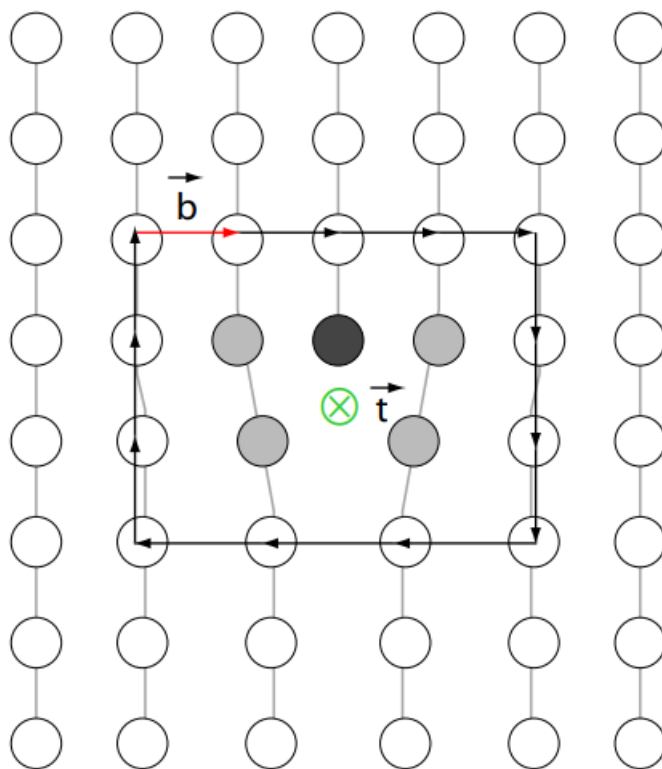
Στην παραπάνω εξίσωση  $v_D$  είναι ο όρος συχνότητας,  $U_\alpha$  η ενέργεια ενεργοποίησης,  $l_\alpha$  το ενεργοποιημένο μήκος διαταραχής που εμπλέκεται στο θερμικό κύκλο και  $l_g$  η απόσταση, που διένυσε η διαταραχή μεταξύ των θερμικών ενεργοποιήσεων,  $k$  η σταθερά Boltzmann's και  $T$  η θερμοκρασία ανόπτησης [26].

Αντίστοιχα, το δεύτερο μέγεθος είναι η πυκνότητα διαταραχών, η οποία περιγράφει τη μέση απόσταση μεταξύ των διαταραχών και μεταβάλλεται στο χρόνο κατά τη διάρκεια μίας διεργασίας [26]. Είναι δηλαδή ένας ρυθμός μεταβολής και πειραματικά προσδιορίζεται από την εξίσωση 2 όταν πρόκειται για κράματα που περιέχουν στερεό διάλυμα πρόσθετου κραματικού στοιχείου (solute) [27].

$$\dot{\rho} = \frac{d\rho_i}{dt} = -2 \cdot v_D \cdot l_g \cdot B_\alpha \cdot C_i \cdot \rho_i^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{U_s}{k \cdot T}} \cdot 2 \sinh \cdot \frac{G \cdot l_j \cdot b^3 \cdot \sqrt{\rho_i}}{k \cdot T}$$

Εξίσωση 2. Ρυθμός μεταβολής διαταραχών [26]

Τέλος, ορίζεται και το διάνυσμα Burgers, το οποίο εκφράζει το εύρος και τον προσανατολισμό της πλεγματικής παραμόρφωσης, που προκύπτει από τη δράση μίας διαταραχής. [24]

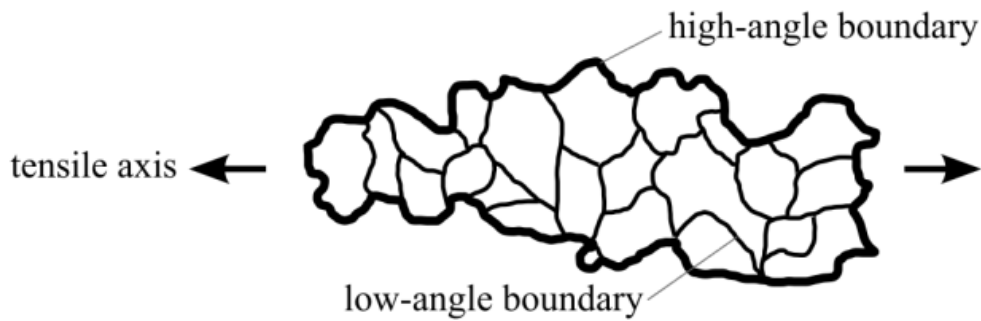


Εικόνα 15. Διάνυσμα b σταθερό στο χώρο [24]

### 2.1.6 Υποκόκκοι

Οι υποκόκκοι είναι δομές εντός του κόκκου, οι οποίοι έχουν μεταξύ τους διαφορά προσανατολισμού μικρότερη της κρίσιμης των 15°, όπου θεωρείται ότι αλλάζει ο κόκκος, αλλά μεγαλύτερη των 0° και συνήθως βρίσκονται στο εύρος 3° - 15° [28]. Δυνητικά μπορούν να εξελιχθούν σε κόκκους και δημιουργούνται, λόγω παραμορφώσεων, όπως οι διαταραχές στο κρυσταλλικό πλέγμα.

Έχει παρατηρηθεί ότι τα όρια υποκόκκων με μεγάλη διαφορά προσανατολισμού μπορούν να μετακινηθούν σχετικά εύκολα όταν ο υποβιβασμός είναι μεγάλος και περιτριγυρίζονται από περιοχές υποκόκκων με όρια μικρής διαφοράς προσανατολισμού. Το αντίθετο δεν ισχύει [30].



Εικόνα 16. Όρια υποκόκκων μικρής και μεγάλης γωνίας [29]

Σε κράματα αλουμινίου οι προαναφερόμενοι υποκόκκοι, αποτελούν συχνά σημείο εκκίνησης της ανακρυστάλλωσης [30]. Όσο μεγαλύτερος ο χρόνος ανόπτησης σε μεγάλους υποβιβασμούς, τόσο οι περιοχές που περιέχουν υποκόκκους με μεγάλη διαφορά προσανατολισμού καταναλώνονται και σχηματίζονται ανακρυσταλλωμένοι κόκκοι, όπως φαίνεται και στην εικόνα 17.



Εικόνα 17. Διαφορά μικροδομής ανάλογα με το χρόνο ανόπτησης (10, 20, 40, 60, 120, 240, 600, 1200 δευτερόλεπτα αντίστοιχα) σε κράμα Al-Mg-Si [30]

### 2.1.7 Μέτρο ελαστικότητας και όριο διαρροής

Για ελάσματα αλουμινίου AA5182 έχει βρεθεί πειραματικά η εξίσωση 3 που συνδέει το μέτρο ελαστικότητας σε MPa με τη θερμοκρασία σε K [28].

$$E = 77,630 - 12.98 T - 0.03084 T^2$$

Εξίσωση 3. Μέτρο ελαστικότητας σε AA5182 [29]

Αντιστοίχως έχει προσδιορισθεί και το όριο διαρροής συναρτήσεως του ορίου διαρροής  $\sigma_0$ , το οποίο μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία, της παραμέτρου υλικού  $\alpha$ , του μέτρου διάτμησης  $\mu$ , το οποίο μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία και της πυκνότητας διαταραχών  $\rho$ , η οποία αναλύθηκε παραπάνω [31].

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha \mu b \sqrt{\rho}$$

Εξίσωση 4. Όριο διαρροής [32]

## 2.2 Προσομοιώσεις μικροδομής

Οι προσομοιώσεις είναι ένα εργαλείο, το οποίο με την αύξηση της διαθέσιμης υπολογιστικής ισχύος και την σύγχρονη μείωση του κόστους αυτής, ενσωματώνεται ολοένα και περισσότερο στη διαδικασία σχεδιασμού και παραγωγής νέων μεταλλικών υλικών υποστηρίζοντας τις εργαστηριακές μεθόδους.

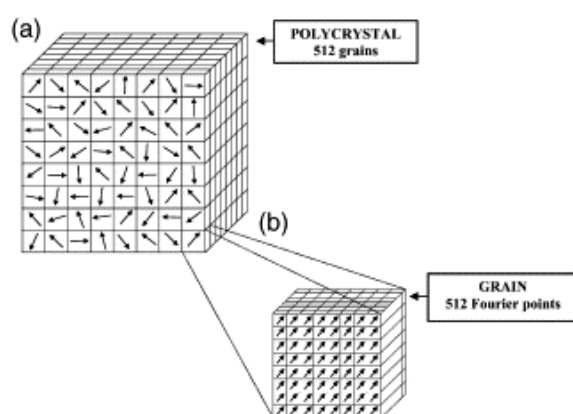
Ωστόσο, μέχρι και πριν από 10-15 χρόνια, οι προσομοιώσεις επικεντρώνονταν στις μακροσκοπικές δοκιμές με μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων. Ως αποτέλεσμα, η χρήση τους στον κλάδο των μεταλλικών υλικών ήταν περιορισμένη, καθώς εξεταζόταν η συμπεριφορά προκαθορισμένων όγκων και σχημάτων και όχι η συμπεριφορά της μικροδομής. Η προσομοίωση συμπεριφοράς μικροδομής είναι εφικτή με μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων, αλλά είναι εξαιρετικά απαιτητική σε υπολογιστική ισχύ και, άρα, σε ενέργεια, χρόνο και κόστος.

Επιπλέον, η προσομοίωση της μηχανικής συμπεριφοράς ενός μακροσκοπικού όγκου δεν είναι δόκιμο να λάβει υπ' όψιν τη μικροδομή τυχαίως προσανατολισμένων κρυστάλλων, καθώς λόγω περιορισμών υπολογιστικής ισχύος θα χρησιμοποιούσε δειγματοληπτικά ένα εξαιρετικά μικρό τμήμα της μικροδομής προϋποθέτοντας



απόλυτη ομοιογένεια μικροδομής στον όγκο. Εξαιρέση αποτελούν οι όγκοι με ολιγοκρυσταλλική προσανατολισμένη μικροδομή ή οι μονοκρυσταλλικοί όγκοι.

Γι' αυτό το λόγο τα τελευταία χρόνια στις προσομοιώσεις μικροδομών σε μικροσκοπικό επίπεδο αναπτύσσεται η χρήση των μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας (Crystal Plasticity), τα οποία μπορούν να επιλυθούν τόσο με επιλύτη πεπερασμένων στοιχείων (Finite Elements Solvers) όσο και με φασματικό επιλύτη (Spectral Solver) [33]. Ο δεύτερος κάνει χρήση μετασχηματισμών Fourier και είναι σημαντικά λιγότερο απαιτητικός σε χρόνο και υπολογιστική μνήμη. Η λειτουργία τους αναλύεται στο ακόλουθο κεφάλαιο. Ως αποτέλεσμα, μέσω των τεχνικών υπολογιστικής μηχανικής υλικών (Integrated Computational Material Engineering - ICME), δίνεται η δυνατότητα ενίσχυσης της μελέτης φαινομένων και συμπεριφορών των σύγχρονων πολυστοιχειακών ανισοτροπικών υλικών [34].



Εικόνα 18. Σε όγκο πλέγματος  $8 \times 8 \times 8$  με 512 κρυστάλλους διαφορετικού προσανατολισμού ο κάθε κρύσταλλος διαιρείται σε  $8 \times 8 \times 8$  υποκύβους ίδιου προσανατολισμού στοιχείων μέσα στο κάθε κρύσταλλο με τα κέντρα του μετασχηματισμού Fourier στο κέντρο κάθε υποκύβου δημιουργώντας πλέγμα Fourier  $64 \times 64 \times 64$  [35]

Ωστόσο, πρέπει να σημειωθεί ότι οι προσομοιώσεις είναι ένα εργαλείο στη φαρέτρα του μηχανικού και δεν αντικαθιστούν τις εργαστηριακές τεχνικές και μεθόδους. Αντ' αυτού υποστηρίζουν τον ερευνητή προκειμένου να εξειδικεύσει και ενισχύσει το έργο του, ειδικά σε ιδιαίτερες εποχές όπως η τρέχουσα με την πανδημία της COVID-19 που η πρόσβαση σε εργαστηριακό εξοπλισμό καθίσταται δύσκολη.

## 2.3 Κρυσταλλική πλαστικότητα & μοντελοποίηση αστοχίας

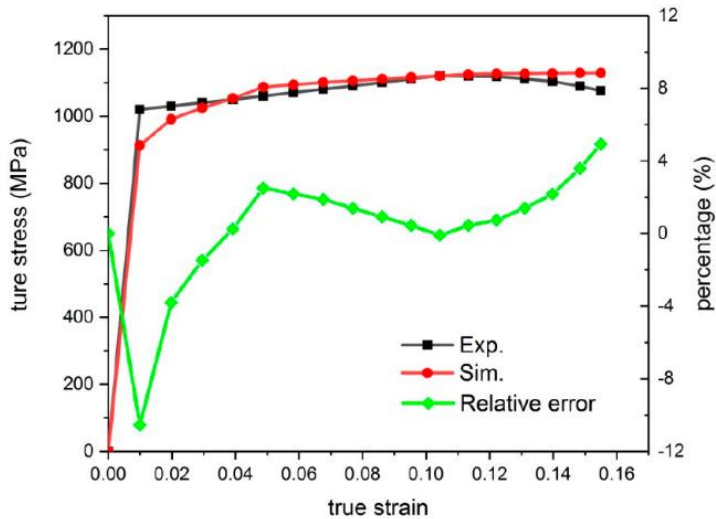
Τα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας έχουν συνδυαστεί αποτελεσματικά την τελευταία δεκαετία με προϋπάρχοντα μαθηματικά μοντέλα, που αποσκοπούν στην προσέγγιση και ερμηνεία της αστοχίας στα όρια των κόκκων. Αυτός ο συνδυασμός, έχει δώσει τη δυνατότητα αξιόπιστων προσομοιώσεων μηχανικής συμπεριφοράς μικροδομών και το κάθε του σκέλος αναλύεται στα ακόλουθα κεφάλαια.

### 2.3.1 Εισαγωγή στα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας

Τα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας διαφέρουν σημαντικά από προηγούμενες εφαρμογές σε μεσοσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο [35]. Επικεντρώνονται στο μικροσκοπικό επίπεδο διερευνώντας τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των φάσεων και των ορίων των κόκκων κρυσταλλικών υλικών [36]. Συγκεκριμένα, το μοντέλο της κρυσταλλικής πλαστικότητας εξετάζει τον τρόπο με τον οποίο παραμορφώνονται κρυσταλλικές δομές με την εφαρμογή εξωτερικού φορτίου [37].

Ένα από τα κορυφαία λογισμικά προσομοιώσεων κρυσταλλικής πλαστικότητας είναι το Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit (DAMASK), το οποίο έχει επιτυχώς χρησιμοποιηθεί για πληθώρα μελετών στον κλάδο των κρυσταλλικών υλικών [38], [39]. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι, πέρα από τον ερευνητικό κλάδο, το DAMASK χρησιμοποιείται πλέον και για βιομηχανικές εφαρμογές από εταιρείες, όπως η TATA Steel και JFE Steel [40].

Το DAMASK έχει βρει ευρεία εφαρμογή, καθώς πρόκειται για υπολογιστικό πακέτο που περιέχει μοντέλα επεξεργασίας τόσο της πλαστικής συμπεριφοράς και αλληλεπίδρασης των κόκκων σε μικροσκοπικό επίπεδο, όσο και της επεξεργασίας του πεδίου φάσης της αστοχίας [36]. Ως αποτέλεσμα, είναι σε θέση να προσεγγίσει το φαινόμενο της παραμόρφωσης και θραύσης με πολυδιάστατο τρόπο προσφέροντας πιο αξιόπιστα αποτελέσματα.



Εικόνα 19. Σύγκριση πειραματικής/υπολογισμένης καμπύλης εφελκυσμού. Η πράσινη γραμμή, που αντιστοιχεί στον δεξι άξονα, παρουσιάζει το σφάλμα της μεθόδου [41]

Αξίζει να σημειωθεί ότι το DAMASK είναι ένα πακέτο που κάνει χρήση συνεχούς μηχανικής (Continuum Mechanics) [37]. Αντιμετωπίζει δηλαδή το προς εξέταση υλικό ως μία συνεχή μάζα, που καταλαμβάνει χώρο αντί για μία συστοιχία πεπερασμένων σωματιδίων. Συνεπώς, είναι δυνατή η χρήση γραμμικής άλγεβρας για τη συσχέτιση των παραμορφώσεων αυτών των όγκων και των προκυπτουσών τάσεων [37].

### 2.3.2 Φαινομενολογικό μοντέλο σύστασης κρυσταλλικής πλαστικότητας

Το βασικότερο μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας είναι το πρώτο που σχεδιάστηκε και συνεπώς, το πιο ώριμο και ονομάζεται Φαινομενολογικό Μοντέλο Σύστασης (Phenomenological constitutive model) για FCC κρυστάλλους. Βασική υπόθεση του μοντέλου αυτού είναι ότι η πλαστική παραμόρφωση σε κρυσταλλικά πλέγματα οφείλεται στο φαινόμενο της κρυσταλλικής ολίσθησης όπου άτομα ολισθαίνουν προς μία διεύθυνση ολίσθησης πάνω σε ένα επίπεδο ολίσθησης συνθέτοντας ένα σύστημα ολίσθησης [37]. Στο κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα υπάρχουν 12

| index | slip direction      | plane normal              |
|-------|---------------------|---------------------------|
| 1     | $[01\bar{1}]$       | $(111)$                   |
| 2     | $[\bar{1}01]$       | $(111)$                   |
| 3     | $[1\bar{1}0]$       | $(111)$                   |
| 4     | $[0\bar{1}\bar{1}]$ | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |
| 5     | $[10\bar{1}]$       | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |
| 6     | $[\bar{1}\bar{1}0]$ | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |
| 7     | $[0\bar{1}\bar{1}]$ | $(1\bar{1}\bar{1})$       |
| 8     | $[\bar{1}0\bar{1}]$ | $(1\bar{1}\bar{1})$       |
| 9     | $[1\bar{1}0]$       | $(1\bar{1}\bar{1})$       |
| 10    | $[011]$             | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |
| 11    | $[10\bar{1}]$       | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |
| 12    | $[\bar{1}\bar{1}0]$ | $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ |

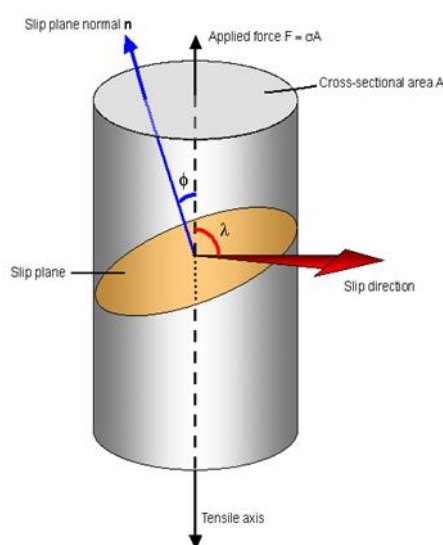
Εικόνα 20. Συστήματα ολίσθησης οικογένειας  $\{111\}$  [42]

συστήματα ολίσθησης στην οικογένεια {111} όπως φαίνεται στον αντίστοιχο πίνακα [42].

Το φαινόμενο της πλαστικής ολίσθησης γ παρατηρείται σε σύστημα ολίσθησης α όταν η διατμητική τάση  $\tau^\alpha$  ξεπεράσει μία οριακή τιμή  $\xi^\alpha$  [37], [38]. Η τιμή  $\tau^\alpha$  δίνεται από την εξίσωση 5:

$$\tau = \frac{F}{A} \times \cos\phi \times \cos\lambda = \sigma \times \cos\phi \times \cos\lambda$$

Εξίσωση 5. Εξίσωση διατμητικής τάσης [43]



Εικόνα 21. Νόμος του Schmid για μονοκρύσταλλο [43]

Στην παραπάνω εξίσωση  $\phi$  είναι η γωνία μεταξύ διεύθυνσης P και διεύθυνσης επιπέδου ολίσθησης και  $\lambda$  η γωνία μεταξύ διεύθυνσης P και διεύθυνσης ολίσθησης, όπου P είναι η διεύθυνση φόρτισης. Ο συντελεστής  $\cos\phi \times \cos\lambda$  ονομάζεται παράγοντας Schmid [43]. Το σύστημα ολίσθησης με τον μεγαλύτερο παράγοντα Schmid ονομάζεται κύριο σύστημα ολίσθησης και είναι αυτό, το οποίο θα ενεργοποιηθεί πρώτο με την εφαρμογή διατμητικής τάσης στον κρύσταλλο [43].

Η τιμή  $\xi^\alpha$  υπολογίζεται από την εξίσωση 6 κάνοντας χρήση της τιμής  $h_0$ , η οποία αναφέρεται στην αρχική σκληρότητα, της τιμής  $h_{\alpha\beta}$ , η οποία αναφέρεται σε ένα συντελεστή αλληλεπίδρασης και της αριθμητικής παραμέτρου  $\alpha$  [36].

$$\dot{\xi}^\alpha = h_0 |\dot{\gamma}^\beta| |1 - \xi^\beta / \xi_\infty^\beta|^a \operatorname{sgn}(1 - \xi^\beta / \xi_\infty^\beta) h_{\alpha\beta}$$

Εξίσωση 6. Εξίσωση μέσης τιμής  $\xi^\alpha$  [36]

Το αποτέλεσμα τροφοδοτείται στην ακόλουθη εξίσωση προκειμένου να προκύψει ο ρυθμός διάτμησης  $\dot{\gamma}^\alpha$  [36].

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 |\tau^\alpha / \xi^\alpha|^n \operatorname{sgn}(\tau^\alpha / \xi^\alpha)$$

Εξίσωση 7. Εξίσωση μέσης τιμής  $\dot{\gamma}^\alpha$  [36]

Το άθροισμα όλων των ρυθμών διάτμησης σε όλα τα συστήματα ολίσθησης προσδιορίζει την κλίση του διανύσματος πλαστικής ταχύτητας παραμόρφωσης, το οποίο χρησιμοποιείται στο υπολογιστικό μοντέλο Material Point Model (MPM) που εκμεταλλεύεται το DAMASK και αναλύεται σε επόμενο κεφάλαιο [36].

### 2.3.3 Μοντέλο κρυσταλλικής πλαστικότητας πυκνότητας διαταραχών

Το μοντέλο αυτό αποτελεί μία σημαντικά πιο εξελιγμένη ερμηνεία του φαινομένου της κρυσταλλικής πλαστικότητας και είναι αυτό που εφαρμόζεται εν τέλει στο DAMASK καθώς επιτρέπει λεπτομερέστερη ερμηνεία της πλαστικής συμπεριφοράς [37].

Αυτό είναι εφικτό καθώς γίνεται χρήση δύο παραδοχών που περιγράφουν την εξέλιξη της πυκνότητας των μεταφερομένων διαταραχών. Συγκεκριμένα, σε αυτό το μοντέλο, θεωρείται ότι πηγή αυτών είναι ο πολλαπλασιασμός τους και σημείο ακύρωσης (sink) αυτών είναι ο σχηματισμός δίπολων διαταραχών, οι οποίες ορίζονται παρακάτω [37].

Σε αυτήν την περίπτωση ο ρυθμός διάτμησης δίνεται από την εξίσωση Orowan, όπως αυτή περιγράφεται παρακάτω: [37]

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho_{sgl}^\alpha b v^\alpha$$

Εξίσωση 8. Εξίσωση Orowan για ρυθμό διάτμησης  $\dot{\gamma}^\alpha$  [37]

Στην παραπάνω εξίσωση ο όρος  $\rho_{sgl}^\alpha$  περιγράφει τη μονοπολική πυκνότητα διαταραχών και  $b$  το μήκος του διανύσματος Burgers [37].

Έπειτα, υπολογίζεται το μέτρο διάτμησης  $G$  μέσω των παρακάτω εξισώσεων [37]:

$$\mathbf{G} = \frac{C_{11}^{iso} - C_{12}^{iso}}{2} \quad C_{11}^{iso} = \frac{3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{5} \quad C_{12}^{iso} = \frac{C_{11} + 4C_{12} - 2C_{44}}{5}$$

Εξίσωση 9. Υπολογισμός μέτρου διάτμησης G [37]

Ο υπολογισμός αυτός είναι απαραίτητος για τον προσδιορισμό της αντίστασης ολίσθησης  $\hat{\tau}^\alpha$  η οποία απαιτείται για τον υπολογισμό της ταχύτητας των διαταραχών και προκύπτει από την εξίσωση 10 [37]:

$$\hat{\tau}^\alpha = \tau_{solute} + \mathbf{Gb} \left( \sum_{\alpha'=1}^{N_{slip}} \xi_{\alpha\alpha'} (\rho^{\alpha'} + \rho_{dip}^{\alpha'}) \right)^{1/2}$$

Εξίσωση 10. Υπολογισμός αντίστασης ολίσθησης  $\hat{\tau}^\alpha$  [37]

Στην παραπάνω εξίσωση  $\tau_{solute}$  είναι η σταθερά αντίσταση ολίσθησης,  $\rho_{dip}^\alpha$  η πυκνότητα διπολικών διαταραχών και  $\xi_{\alpha\alpha'}$  η δύναμη αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο διαφορετικών συστημάτων ολίσθησης  $\alpha$  και  $\alpha'$  [37]. Σημειώνεται ότι ως διπολική διαταραχή εννοείται εκείνη, που σχηματίζεται κατά τη δημιουργία μίας κοχλιωτής διαταραχής με μικρή πλαστική παραμόρφωση, με σύγχρονη δημιουργία μικρών ακμών, οι οποίες κατόπιν μεγεθύνονται και ακολουθούν τη μετακινούμενη διαταραχή κοχλία [44].

Τέλος, υπολογίζεται η ταχύτητα των διαταραχών μέσω της παραδοχής ότι η κίνηση ενεργοποιείται θερμικά. Δίνεται από την εξίσωση 11 όπου  $v_0$  η ταχύτητα παραμόρφωσης σε συγκεκριμένο σύστημα ολίσθησης με αντίσταση ολίσθησης  $\hat{\tau}^\alpha$ ,  $Q_0$  η ενέργεια ενεργοποίησης ολίσθησης διαταραχών,  $k_B$  η σταθερά Boltzmann,  $T$  η θερμοκρασία,  $p$  και  $q$  αριθμητικοί παράμετροι και  $\tau^\alpha$ , η τρέχουσα διατμητική τάση η οποία προκύπτει από το νόμο του Schmid [37].

$$v^\alpha = v_0 \exp \left[ \left( -\frac{Q_0}{k_B T} \left( 1 - \frac{|\tau^\alpha|}{\hat{\tau}^\alpha} \right)^p \right)^q \right] \text{sign}(\tau^\alpha)$$

Εξίσωση 11. Εξίσωση για υπολογισμό ταχύτητας διαταραχών [37]

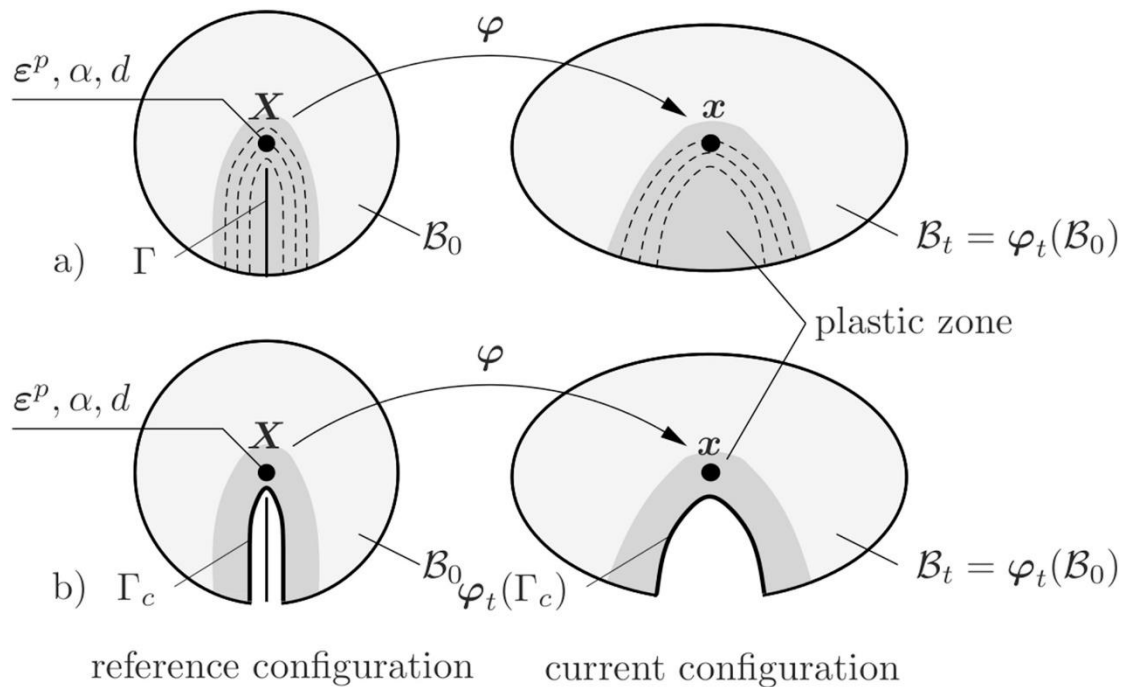
#### 2.3.4 Αρχές μοντελοποίησης αστοχίας με την μέθοδο πεδίου φάσης

Ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα του DAMASK είναι η χρήση και της μοντελοποίησης της αστοχίας με την μέθοδο του πεδίου φάσης (Phase Field Modelling of Fracture) [38], [45]. Στο συγκεκριμένο μοντέλο χρησιμοποιείται μία

κλιμακωτή, μη-τοπικά ορισμένη, μεταβλητή  $\phi$  για να χαρτογραφήσει τη μετάβαση από μία τελείως ακέραια περιοχή που δεν εξαρτάται χρονικά ( $\phi = 1$ ) με παραμέτρους  $B_0$  προς μία τελείως κατεστραμμένη περιοχή ( $\phi = 0$ ) με παραμέτρους  $B_t$ , η οποία εξαρτάται πλέον από το χρόνο [36], [37]. Η εξέλιξη της  $\phi$  εξαρτάται από την απελευθέρωση της συνολικής ελεύθερης ενέργειας σύμφωνα με την εξίσωση 12 [36], [37].

$$\dot{\phi} = -M \left[ 2\phi \mathbf{S} \cdot \mathbf{E} - \frac{G_0}{l_0} - \nabla G_0 l_0 \nabla \phi \right]$$

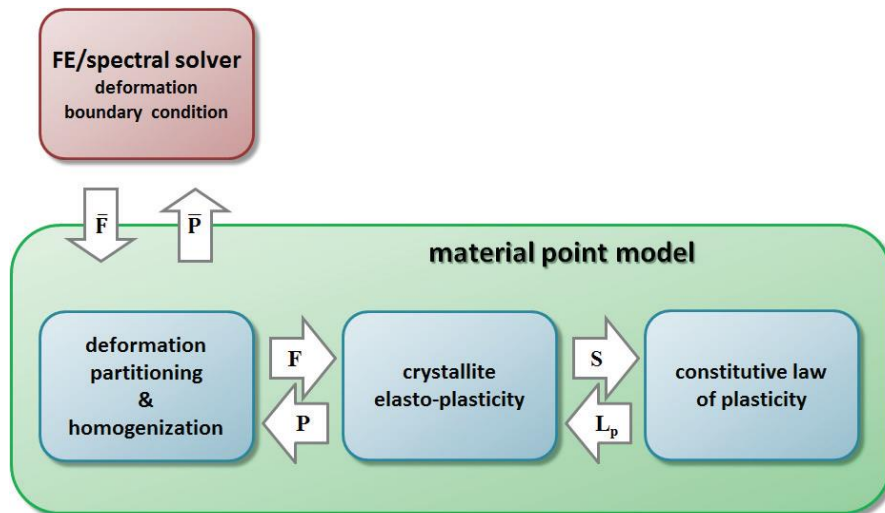
Εξίσωση 12. Ρυθμός μεταβολής  $\phi$  Ginzburg-Landau [37]



Εικόνα 22. Μοντελοποίηση περιοχή θραύσης με τη μεταβλητή  $\phi$  [45]

### 2.3.5 Material Point Model (MPM)

Το λογισμικό DAMASK χρησιμοποιεί το MPM προκειμένου να προσεγγίσει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ οριακών όγκων, όπως τα όρια των κόκκων ενός κρυσταλλικού υλικού. Το MPM αποτελεί τη προσαρμογή των νόμων της συνεχούς μηχανικής σε υπολογιστικό περιβάλλον, προκειμένου να μοντελοποιήσει την παραμόρφωση ως μεταβολή του χώρου, που καταλαμβάνει ο εξεταζόμενος όγκος [34].

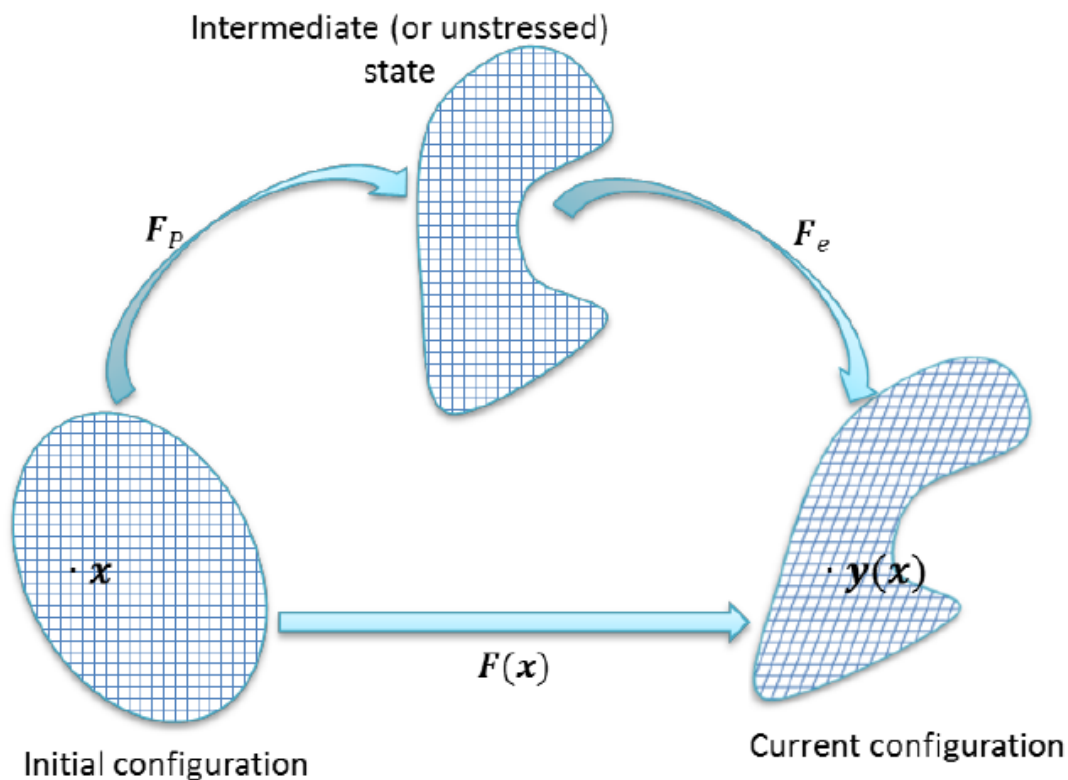


Εικόνα 23. Material Point Model [34]

Θεωρώντας ότι η θέση των σημείων ενός σώματος στον αρχικό μη παραμορφωμένο όγκο είναι  $\bar{x}$  και στον τελικό παραμορφωμένο όγκο μετά από κάποιο χρονικό διάστημα είναι  $\bar{y}$ , τότε η κλίση του διανύσματος μέσης παραμόρφωσης  $\bar{F}$  δίνεται από τη σχέση  $\bar{F} = \frac{\partial y}{\partial x}$  [37]. Με αυτόν τον τρόπο η παραμόρφωση συνδέει την αρχική με την τελική διάταξη των σημείων στο χώρο, αφού έχουν υποστεί παραμόρφωση. Λεπτομερή περιγραφή της παραπάνω διαδικασίας έχει συντάξει ο D.Wang (2019).

Το MPM βασίζεται σε μία σχέση αλληλεπίδρασης μεταξύ της κλίσης του διανύσματος μέσης παραμόρφωσης  $\bar{F}$  και του τανυστή πρώτης Piola-Kirchhoff τάσης  $\bar{P}$ . Η  $\bar{F}$  αποτελεί το εσωτερικό γινόμενο της κλίσης του διανύσματος ελαστικής παραμόρφωσης  $\bar{F}_e$  και της κλίσης του διανύσματος πλαστικής παραμόρφωσης  $\bar{F}_p$  λόγω ολίσθησης [37]. Σημειώνεται ότι αυτός ο υπολογισμός αποτελεί μία παραδοχή για χρήση σε υπολογιστικό περιβάλλον.





Εικόνα 24. Ανάλυση κλίσης διανύσματος παραμόρφωσης [37]

Η τάση  $\bar{P}$  αφορά έναν εναλλακτικό τρόπο προσδιορισμού της τάσης σε έναν όγκο. Επιτρέπει την άμεση συσχέτιση μεταξύ των δυνάμεων που δρουν χωρικά σε έναν όγκο και των ιδιοτήτων του υλικού του σώματος εκφράζοντας, έτσι, ένα τρισδιάστατο μέγεθος στη μονοδιάστατη μηχανική τάση. Είναι ενεργειακά συνδεδεμένο με την κλίση του διανύσματος  $\bar{F}$  [37].

Η τάση  $\bar{P}$  δίνεται από την εξίσωση 13 όπου  $J = \det F$ , όπου  $F$  η κλίση του διανύσματος παραμόρφωσης και  $\sigma$  η ασκούμενη τάση [46]. Παρατηρείται ότι η εξίσωση περιέχει δύο διαφορετικά συστήματα αναφοράς και γι' αυτό πρόκειται για διπλό δάνυσμα προκειμένου να συσχετισθεί το σύστημα αναφοράς, που αφορά στο αρχικό υλικό (μέσω του  $F_{Lk}$ ) και στο σύστημα αναφοράς της μηχανικής τάσης ( $\sigma_{ik}$ ) [37], [46].

$$P_{iL} = J \sigma_{ik} F_{Lk}^{-1}$$

Εξίσωση 13. Εξίσωση 1<sup>ου</sup> Piola-Kirchhoff τανυστή τάσης [46]

Το μοντέλο MPM, λαμβάνει την κλίση του διανύσματος μέσης παραμόρφωσης  $\bar{F}$  και αναλαμβάνει, στο πρώτο στάδιο, να τη διαιρέσει σε ξεχωριστές κλίσης διανύσματος παραμόρφωσης  $F$  για κάθε κρύσταλλο [34].

Έπειτα, στο δεύτερο επίπεδο, η παραμόρφωση χωρίζεται στην ελαστική  $F_e$  και την πλαστική  $F_p$  και υπολογίζονται σε κρυσταλλικό επίπεδο με τη βοήθεια της δεύτερης Piola-Kirchhoff τάσης  $S$  [37]. Ο υπολογισμός γίνεται με βάση τα δεδομένα που προκύπτουν από το τρίτο και τελευταίο επίπεδο σύμφωνα με τον τύπο της εξίσωσης 14, όπου  $C$  η ανισοτροπική ελαστική σκληρότητα και  $I$  η ελαστική τάση Green-Lagrange [34].

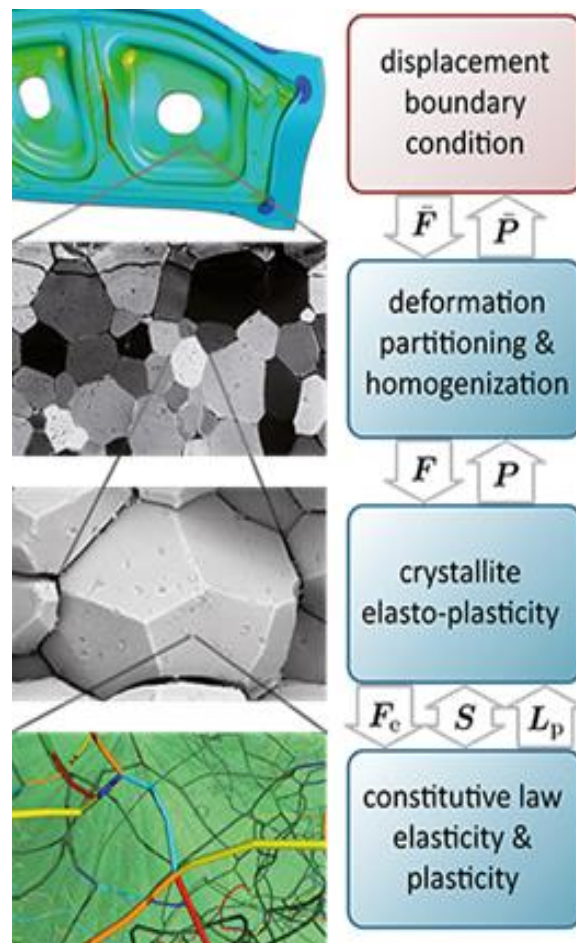
$$S = C (F_e^T F_e - I) / 2$$

Εξίσωση 14. Δεύτερης Piola-Kirchhoff τάση  $S$  [37]

Σε αυτό η ελαστική παραμόρφωση χρησιμοποιείται προκειμένου να διαμορφωθεί η κλίση του διανύσματος ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης  $L_p$  ως συνάρτηση του αθροίσματος ρυθμών διάτμησης κάθε συστήματος ολίσθησης και των μεγεθών  $b^a$  και  $n^a$ , τα οποία είναι μοναδιαία διανύσματα στη διεύθυνση και στο επίπεδο ολίσθησης αντίστοιχα [34], [37].

$$L_p = \dot{F}_p F_p^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} b^{\alpha} \otimes n^{\alpha}$$

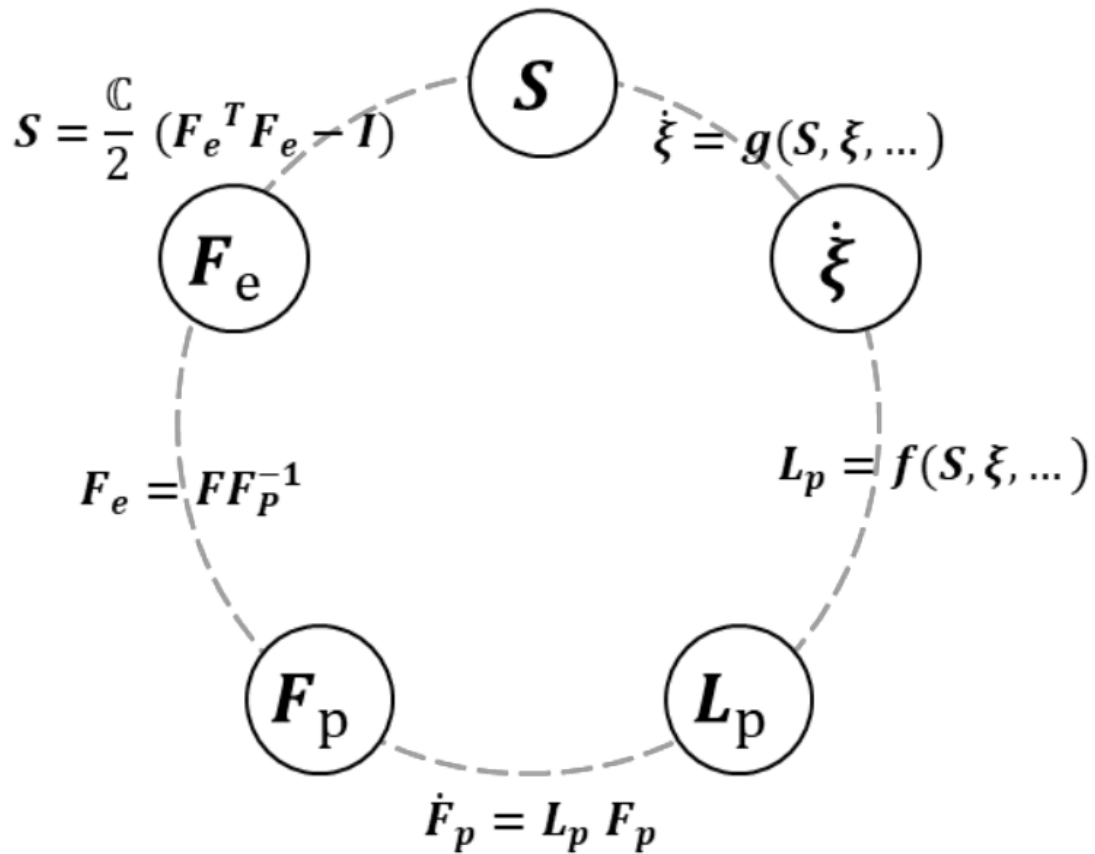
Εξίσωση 15. Κλίση του διανύσματος ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης  $L_p$  [37]



Εικόνα 25. Δομή MPM όπου παρατηρείται η αρχιτεκτονική του μοντέλου, όπου το πρώτο επίπεδο αφορά τον μακρόκοσμο, το δεύτερο αφορά στο σύνολο των κόκκων, το τρίτο αφορά στον κάθε κόκκο ξεχωριστά και το τέταρτο αφορά στη μικροδομή του εκάστοτε κόκκου [40]

Επιστρέφοντας στο δεύτερο επίπεδο, η τάση  $S$  χρησιμοποιείται στο ελαστικο-πλαστικό πρόβλημα προκειμένου να προκύψει η κάθε ξεχωριστή τάση  $P$  και να συσχετισθεί με την κάθε  $F$  [34].

Τέλος, στο πρώτο επίπεδο, ομαδοποιούνται/ενοποιούνται οι τιμές  $P$  και προκύπτει η  $\bar{P}$ , η οποία χρησιμοποιείται για να υπολογισθεί η  $\bar{F}$  και να προκύψει η παραμόρφωση του όγκου. Η διαμόρφωση αυτού αναλύεται στο επόμενο κεφάλαιο [34].



Εικόνα 26. Αρχιτεκτονική προσδιορισμού ελαστικο-πλαστικής συμπεριφοράς [34]

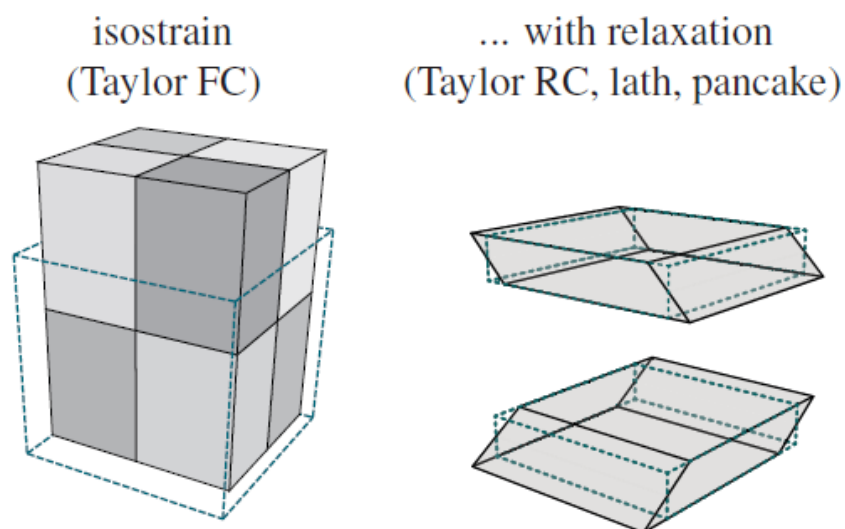
## 2.4 Αντιπροσωπευτικό στοιχείο/ κυψελίδα όγκου (Representative Volume Element – RVE)

Με γνωστές πλέον τις βασικές αρχές λειτουργίας του DAMASK, η προσομοίωση όπως και σε πολλά άλλα λογισμικά (προσομοίωσης), απαιτεί δύο βασικά στοιχεία. Το πρώτο είναι η περιγραφή της δοκιμής, που θα μελετηθεί και το δεύτερο είναι η περιγραφή του όγκου, ο οποίος θα υποβληθεί στην προαναφερόμενη δοκιμή.

Ο όγκος αυτός, ονομάζεται αντιπροσωπευτικό στοιχείο όγκου (Representative Volume Element – RVE) και είναι ο μικρότερος δυνατός όγκος που αντικατοπτρίζει τη συμπεριφορά του συνολικού όγκου.

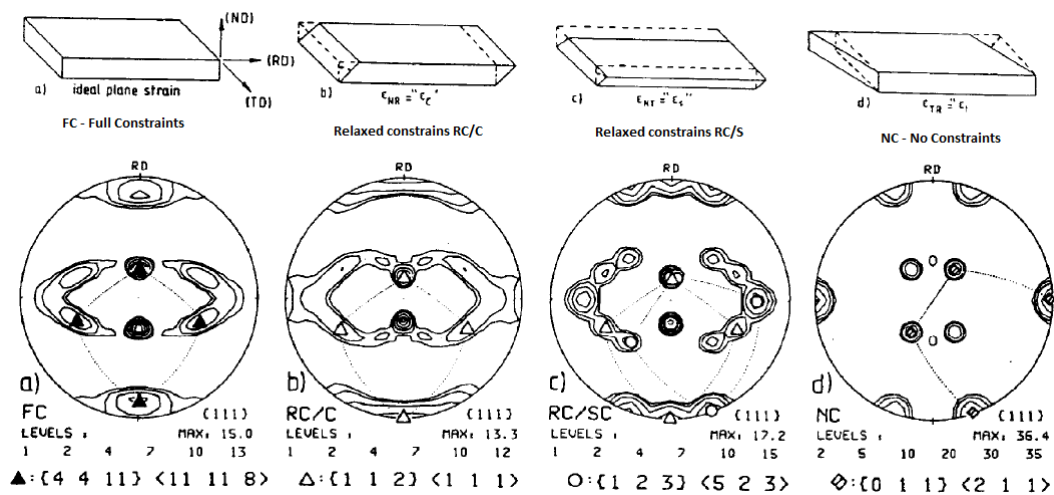
Με την σειρά του περιγράφεται και αυτός από δύο βασικές παραμέτρους. Η πρώτη αφορά στο σχήμα και στις διαστάσεις, είτε στον δισδιάστατο είτε στον τρισδιάστατο χώρο και η δεύτερη αφορά στον κρυσταλλογραφικό ιστό (texture), μέσω του οποίου καθορίζονται οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού και ο βαθμός ιστροπίας αυτών [47].

Η χρήση των RVEs είναι δυνατή λόγω των τεχνικών ομογενοποίησης <sup>1</sup> (homogenisation), οι οποίες έχουν βελτιωθεί αρκετά τα τελευταία χρόνια. Μέσω των μεθόδων αυτών, η μηχανική συμπεριφορά των κόκκων μελετάται ενιαία, προκειμένου να προσεγγιστεί η συμπεριφορά τους, αντί να μοντελοποιηθεί η συμπεριφορά του καθενός ξεχωριστά [38]. Αποτέλεσμα αυτού είναι σε προσομοιώσεις πολυκρυσταλλικών υλικών να επιτυγχάνεται δραστική μείωση του υπολογιστικού κόστους. Μάλιστα, ανάλογα με τις συνθήκες και το υλικό, που εξετάζονται, ενεργοποιούνται διαφορετικά μοντέλα ομογενοποίησης. Στο DAMASK χρησιμοποιούνται τα μοντέλα FC Isostrain (Taylor FC), όπου ως αρχική βάση θεωρείται ότι όλοι οι κόκκοι θα παραμορφωθούν αντίστοιχα, καθώς και το μοντέλο Relaxed Grain Cluster (RGC), το οποίο εξετάζει και ομογενοποιεί την αλληλεπίδραση των ορίων των κόκκων επιτρέποντας, έτσι, έναν διαφορετικό βαθμό διάτμησης ανά κόκκο, όπως φαίνεται στις παρακάτω εικόνες [19], [38], [48]. Η μαθηματική ανάλυση των δύο τεχνικών ομογενοποίησης ξεφεύγει από τον στόχο της παρούσας εργασίας. Σημειώνεται ωστόσο, ότι και οι δύο τεχνικές έχουν χρησιμοποιηθεί και επιβεβαιωθεί τόσο σε ερευνητικό όσο και σε βιομηχανικό επίπεδο [34]. Ειδικές πληροφορίες σχετικά με την ανάλυση των RVEs και των μοντέλων ομογενοποίησης μπορούν να βρεθούν στη μελέτη του H. Moussaddy [49].



Εικόνα 27. Μοντέλα ομογενοποίησης στο DAMASK [34]

<sup>1</sup> Οι τεχνικές ομογενοποίησης ψηφιακών όγκων δεν αναφέρονται στη χημική ομογενοποίηση που έπεται της χύτευσης



Εικόνα 28. Βασικός κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός ως {111} πολικός χάρτης σε προσομοίωση 1000 κόκκων σε παραμόρφωση με τους αναγραφόμενους περιορισμούς [19]

Είναι σαφές πλέον ότι τα RVEs είναι ένα μέσο, μία δομή, η οποία περιέχει μία επαρκή πυκνότητα μικρό-ετερογενειών, ώστε να είναι επαρκώς λεπτομερής προκειμένου να χαρακτηρίζεται ως στατιστικά αντιπροσωπευτική της συνολικής συμπεριφοράς ενός υλικού [50].

Τα RVEs είναι εξαιρετικά υψηλής σημασίας, καθώς επιτρέπουν τη διεξαγωγή προσομοιώσεων σε ένα πεπερασμένο σύνολο στοιχείων με αριθμητικές μεθόδους. Αντιθέτως, οι ασυμπτωτικές προσεγγιστικές μέθοδοι, που χρησιμοποιούνται παραδοσιακά, αφορούν τυχαίες συνθέσεις μέσων προς προσομοίωση, των οποίων ο όγκος δυνητικά τείνει στο άπειρο [50]. Συνεπώς, με τα RVEs, η προσομοίωση μετατρέπεται από μη πεπερασμένο σε πεπερασμένο πρόβλημα και επιτρέπει την εξαγωγή αποτελεσμάτων με μεγαλύτερη εμπιστοσύνη εξοικονομώντας παράλληλα υπολογιστικούς πόρους και χρόνο.

## 2.5 Εναλλακτικά λογισμικά

Το DAMASK δεν είναι το μοναδικό πακέτο λογισμικού, που βρίσκει εφαρμογή στο χώρο της ICME. Λογισμικά που χρησιμοποιούν επιλύτες πεπερασμένων στοιχείων όπως το Ansys (της Ansys Inc., η οποία δραστηριοποιείται ενεργά και στην Ελλάδα με

κέντρο έρευνας και ανάπτυξης) ή το Abaqus (της Dassault Systems), έχουν επίσης τη δυνατότητα αντιμετώπισης προσομοιώσεων κρυσταλλικής πλαστικότητας. Ωστόσο, το DAMASK, κάνοντας χρήση φασματικού επιλύτη, προτιμάται στις περιπτώσεις προσομοίωσης μικροδομής λόγω των πλεονεκτημάτων, που συζητήθηκαν προηγουμένως.

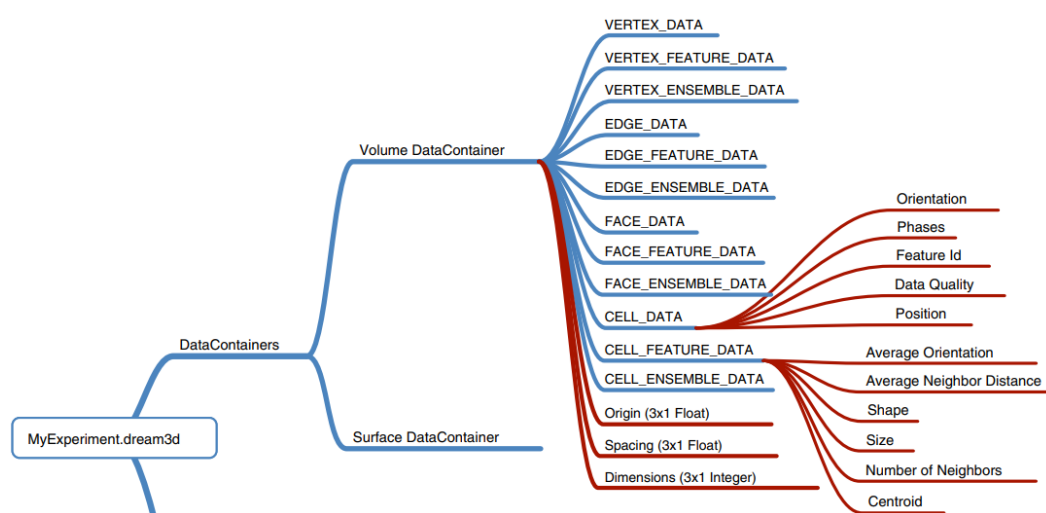
### 3 Πειραματικό Μέρος

#### 3.1 Δημιουργία αντιπροσωπευτικού στοιχείου όγκου (RVE)

Το Representative Volume Element (RVE) μπορεί να προκύψει με δύο βασικούς τρόπους. Ο πρώτος είναι με βάση πειραματικά δεδομένα, όπου δεδομένα από εργαστηριακές μεθόδους ερμηνεύονται και σχηματίζεται ένας αντιπροσωπευτικός όγκος με φάσεις και κρυσταλλογραφικό ιστό αντίστοιχο με αυτό του σαρωμένου δείγματος. Ο δεύτερος τρόπος είναι με βιβλιογραφικές παραμέτρους, όπου σχηματίζεται μια τυχαία μικροδομή και κρυσταλλογραφικός ιστός με βάση την αναμενόμενη δομή, η οποία έχει προκύψει από βιβλιογραφική ή εργαστηριακή ανασκόπηση.

Στην παρούσα εργασία θα παρουσιαστεί τόσο η πρώτη μέθοδος όσο και η δεύτερη με μοντελοποίηση δομής κράματος AA5182. Η διαφοροποίηση αυτή οφείλεται στην αδυναμία διεξαγωγής σαρώσεων EBSD στο επιθυμητό κράμα λόγω των περιορισμών, που επέβαλε η πανδημία του COVID-19.

Η αρχιτεκτονική ενός RVE είναι αρκετά πολύπλοκη και περιέχει, μεταξύ άλλων, πληροφορίες τόσο για τον προσανατολισμό και το μέγεθος των κόκκων, όσο και για τις φάσεις και για το σχήμα αυτών. Η ακριβής δομή παρουσιάζεται στην εικόνα 29.

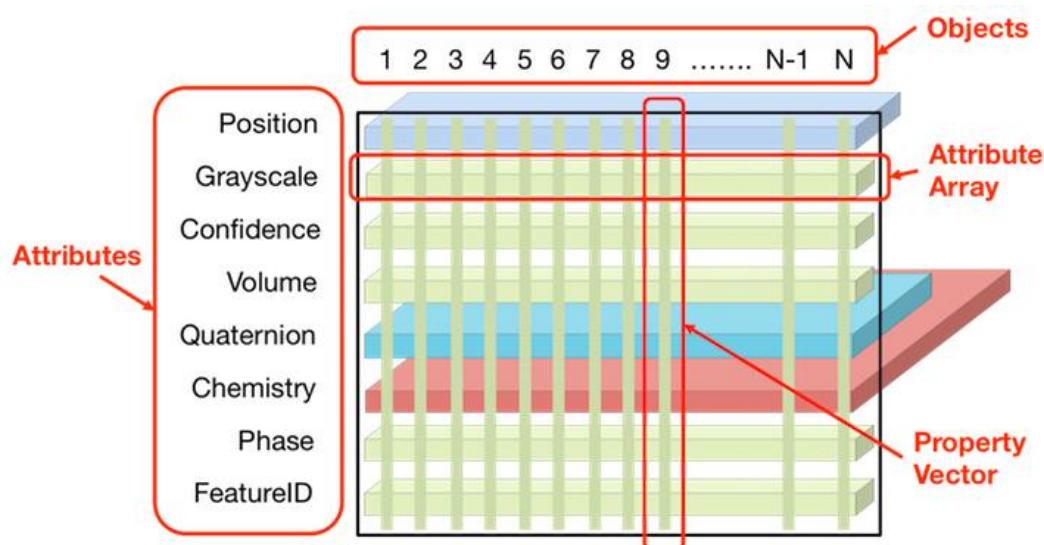


Εικόνα 29. Αρχιτεκτονική αρχείου που θα χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία RVE

[51]



Το λογισμικό που χρησιμοποιείται ευρέως στην ερευνητική κοινότητα για δημιουργία RVE από σάρωση EBSD είναι το πακέτο MTEX του MATLAB, το ανεξάρτητο λογισμικό ATEX και, κυρίως, το ανεξάρτητο λογισμικό DREAM3D, το οποίο συνδέεται απευθείας με λογισμικά εξοπλισμού EBSD, όπως στην περίπτωση της Oxford Instruments. Το DREAM3D αναπτύχθηκε αρχικά για χρήση από το υπουργείο άμυνας των ΗΠΑ και συγκεκριμένα για το ερευνητικό τμήμα της πολεμικής αεροπορίας. Έκτοτε, μεγάλο μέρος του πακέτου έχει γίνει διαθέσιμο για ερευνητικούς σκοπούς και αποτελεί λογισμικό ανοικτού κώδικα [52].



Εικόνα 30. Αρχιτεκτονική αρχείου DREAM3D [53]

### 3.1.1 Δημιουργία RVE από αρχείο EBSD

Ο πλέον δόκιμος τρόπος για τη δημιουργία ενός RVE είναι με εισαγωγή δεδομένων από σαρώσεις EBSD [54]. Η μέθοδος αυτή έχει δοκιμαστεί και αποδειχθεί από άλλους συγγραφείς, όπως στην περίπτωση των D.Brands et al. (2016) [54], οι οποίοι εξέτασαν διφασικό χάλυβα.

Στόχος είναι ο ορισμός μιας αρχικής (reference) δομής και μηχανικών ιδιοτήτων, οι οποίες μπορούν να συγκριθούν με εργαστηριακές προκειμένου να επικυρωθεί η ακρίβεια τους. Έπειτα, μπορεί να ακολουθήσει η παραμετροποίηση της αρχικής δομής με την προσθήκη ή αφαίρεση ιστού, την αλλαγή σχήματος των κόκκων προκειμένου να προσομοιωθεί μία διεργασία, την προσθήκη φάσεων ή άλλων

κραματικών στοιχείων και την πραγματοποίηση άλλων τροποποιήσεων. Με αυτόν τον τρόπο μπορούν να παραχθούν πολλά και διαφορετικά RVEs προκειμένου να μελετηθούν οι διαφορές στις θερμικές και μηχανικές ιδιότητες, που προσδίδει η κάθε τροποποίηση. Συνεπώς, δίνεται η δυνατότητα ελέγχου σημαντικά περισσότερων κραμάτων από τον μηχανικό πριν τη μετάβαση στο επόμενο στάδιο της έρευνας ή του ελέγχου ποιότητας.

Αναλυτικά, η ερμηνεία και δημιουργία ενός reference RVE ενός αγνώστου κράματος αποτελείται από τρεις εργαστηριακές δοκιμές και μία υπολογιστική. Η ακολουθία των διεργασιών έχει ως εξής:

- 1) Σάρωση XRD προκειμένου να εκτιμηθούν οι αναμενόμενες φάσεις και, συνεπώς, τα συστήματα κρυστάλλωσης προκειμένου να προετοιμασθεί η σάρωση EBSD
- 2) Σάρωση EBSD προκειμένου να αναγνωρισθεί ο προσανατολισμός και το σύστημα κρυστάλλωσης του δείγματος και να επιβεβαιωθεί η ύπαρξη της εκάστοτε φάσης
- 3) Σύνθεση RVE

Οι πρώτες τρεις διεργασίες είναι καθαρά εργαστηριακές ενώ η τέταρτη υπολογιστική. Συγκεκριμένα, με το πέρας της σάρωσης EBSD και ανάλογα με το λογισμικό ελέγχου, υπάρχει είτε η δυνατότητα απευθείας δημιουργίας RVE μέσω του DAMASK, είτε η ερμηνεία και παραμετροποίηση με επιπλέον λογισμικό όπως το DREAM3D που αναφέρθηκε νωρίτερα. Το τελικό αρχείο RVE είναι τύπου VTK Image Data με κατάληξη .vti και ερμηνεύεται από διάφορα λογισμικά τρισδιάστατης αναπαράστασης όπως το Paraview.

Αναλυτικά, το λογισμικό DAMASK είναι σε θέση να συνθέσει ένα RVE με δεδομένα όπως οι γωνίες Euler των κόκκων, ο τύπος και το ποσοστό συμμετοχής των εμπλεκόμενων φάσεων και οι μηχανικές ιδιοτήτων τους. Αυτή η μέθοδος απαιτεί τη χρήση επεξεργάσιμου αρχείου με τους προσανατολισμούς και τις φάσεις υπό μορφή προτυποποιημένου πίνακα κώδικα ASCII. Τα περισσότερα πακέτα λογισμικού που συνοδεύουν EBSD διατάξεις έχουν τη δυνατότητα σύνθεσης τέτοιου αρχείου. Το DAMASK διαβάζει αυτό το αρχείο σε συνδυασμό με ένα επιπλέον αρχείο, που ορίζει

τις μηχανικές ιδιότητες των φάσεων και συνθέτει ένα τελικό RVE. Αυτή η διεργασία αποτελεί ένα εργαλείο προ-επεξεργασίας (pre-processing) ενσωματωμένο στο DAMASK και συγκαταλέγεται στη λίστα τέτοιων εργαλείων, που επιτρέπουν την εύκολη και άμεση παραμετροποίηση των RVEs [55].

Στην περίπτωση, όπου το αρχείο που προκύπτει από το πακέτο λογισμικού του EBSD δεν είναι άμεσα επεξεργάσιμο από το DAMASK, όπως στα πακέτα της εταιρείας EDAX, υπάρχει η δυνατότητα επεξεργασίας με το DREAM3D. Συγκεκριμένα, δομείται μία σειρά βημάτων προκειμένου να αναγνωσθεί το αρχείο από το DREAM3D, να φιλτραριστεί και αφαιρεθεί ο θόρυβος, να περιστραφεί το σύστημα αναφοράς και να συντεθεί χρωματικά ο χάρτης IPF [51]. Με το πέρας αυτής της διαδικασίας παράγεται ένα αρχείο .vti έτοιμο να αξιοποιηθεί σε προσομοίωση στο DAMASK. Επιπλέον, υπάρχει η δυνατότητα αφαίρεσης περιοχών με χαμηλό δείκτη εμπιστοσύνης και αντικατάστασης τους μέσω τεχνικών εκτίμησης, που βασίζονται σε δειγματοληπτικά δεδομένα από τις γειτονικές υγιείς περιοχές του δείγματος [56].



Εικόνα 31. Αρχιτεκτονική διάταξης για ερμηνεία δεδομένων EBSD και παραγωγή αρχείου .vti αρχείου στο λογισμικό DREAM3D [56]

Εικόνα 32. Τελικό RVE που προέκυψε από τη διάταξη του λογισμικού DREAM3D [56]

### 3.1.2 Δημιουργία RVE από βιβλιογραφικά δεδομένα (5XXX)

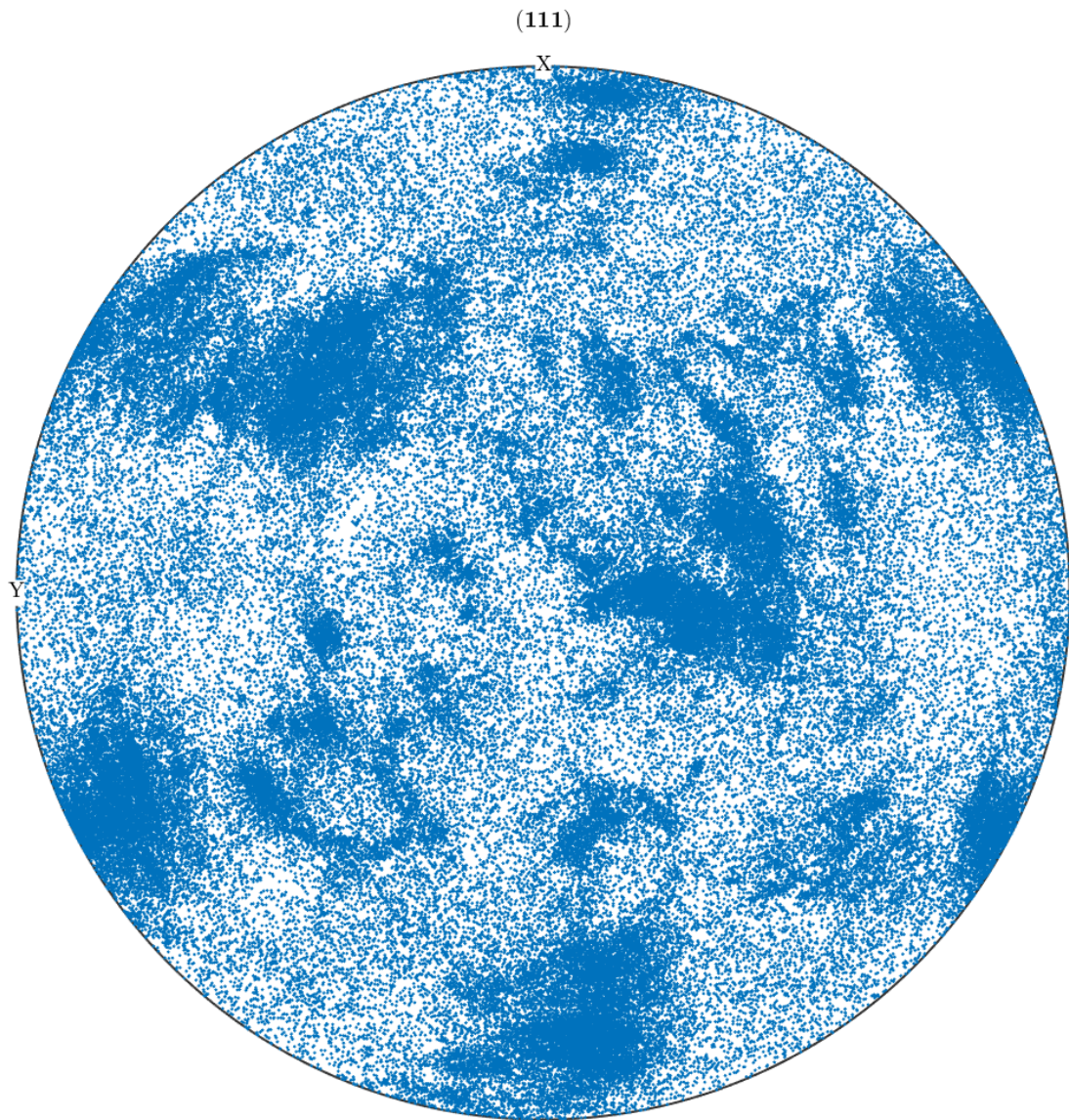
Όπως αναφέρθηκε, δεν ήταν δυνατή η ολοκλήρωση όλων των σχεδιαζόμενων σαρώσεων EBSD. Συγκεκριμένα, δεν υπήρξε περιθώριο για παραμετροποίηση του

λογισμικού που συνοδεύει τη διάταξη EDAX EBSD, που βρίσκεται στο ερευνητικό εργαστήριο ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. και, συνεπώς, δεν ήταν απολύτως ασφαλής η χρήση των υπαρχόντων αρχείων EBSD για τη δημιουργία ενός αντιπροσωπευτικού RVE. Γι' αυτό τον λόγο, το RVE κατασκευάστηκε με βάση τα δεδομένα της σάρωσης και εμπλουτίστηκε με βιβλιογραφικά δεδομένα, όπου δεν ήταν εφικτή η λήψη μετρήσεων, όπως περιγράφεται παρακάτω.

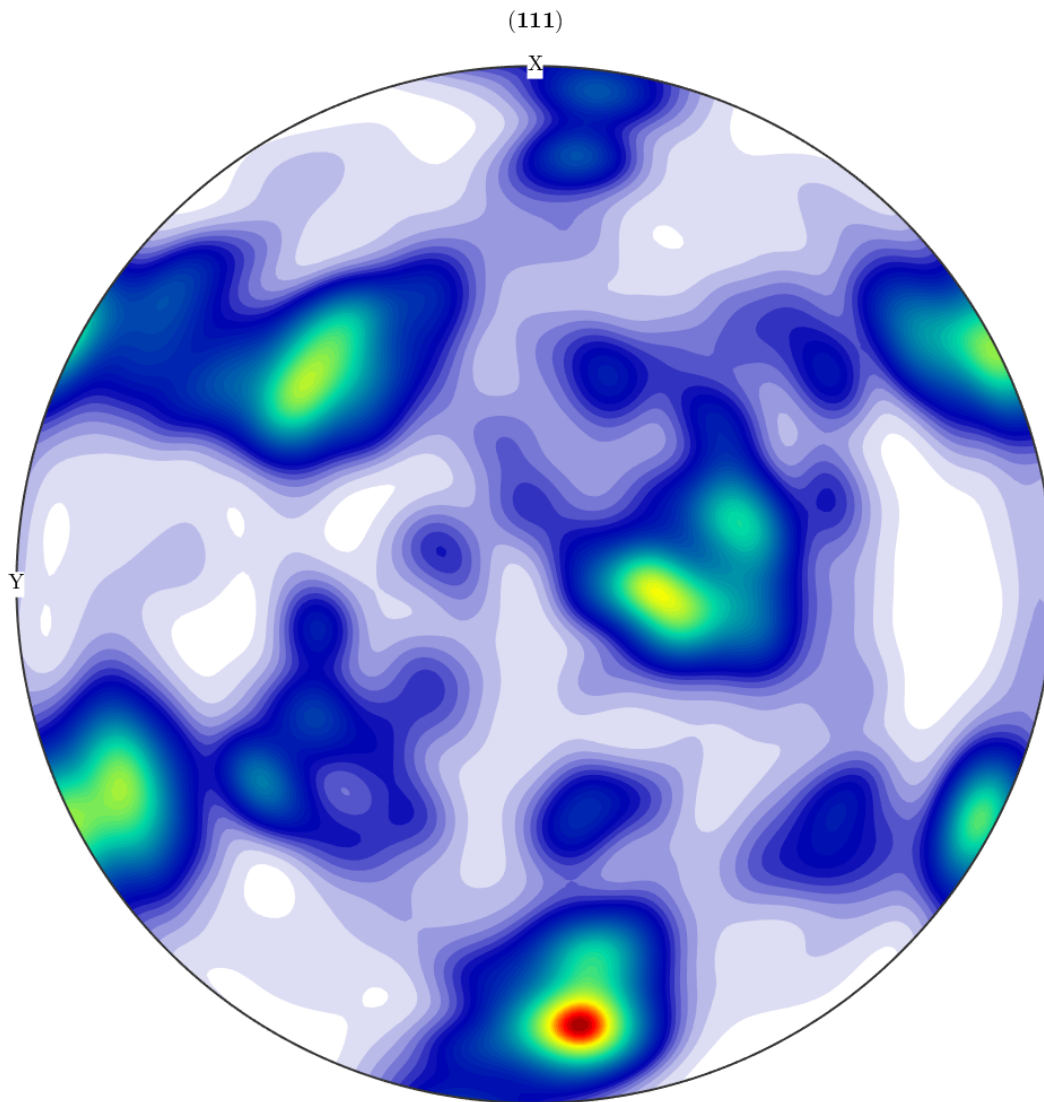
Το εξεταζόμενο κράμα είναι το AA5182, ψυχρά ελασμένο με υποβιβασμό 90% και πλήρως ανακρυσταλλωμένο, όπως συζητήθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο. Συνεπώς, με βάση τα προηγούμενα κεφάλαια, αναμένεται να κυριαρχεί σχετικά τυχαίος προσανατολισμός, αλλά πιθανώς και η ύπαρξη cube ιστού. Αναμένεται επίσης οι κόκκοι να είναι σχεδόν ισο-αξονικοί λόγω της πλήρους ανακρυστάλλωσης. Ακόμη, αναμένεται φάση αλουμινίου και  $Mg_2Si$  οι οποίες κρυσταλλώνονται στο fcc.

Η διαδικασία εκκινεί με την επεξεργασία του αρχείου σάρωσης από το πρόγραμμα MTEX του MATLAB. Η ερμηνεία έγινε με την έκδοση 5.7.0 του MTEX, το οποίο εγκαταστάθηκε στην έκδοση R2021b του MATLAB με την εκπαιδευτική άδεια που χορηγήθηκε από το ΕΜΠ.

Το πρώτο βήμα είναι η εισαγωγή του αρχείου, όπου αναφέρονται 36.600 διαφορετικά σετ προσανατολισμών. Συνεπώς, στη σάρωση περιλαμβάνονται 36.600 ξεχωριστοί κόκκοι. Σε αυτούς αναμένεται τυχαίος προσανατολισμός και cube ιστός, λόγω της ανακρυστάλλωσης. Η υπόθεση επιβεβαιώνεται από το παρακάτω πολικό διάγραμμα του δείγματος στο επίπεδο {111}, όπου παρατηρείται τυχαία διασπορά και συστάδες.

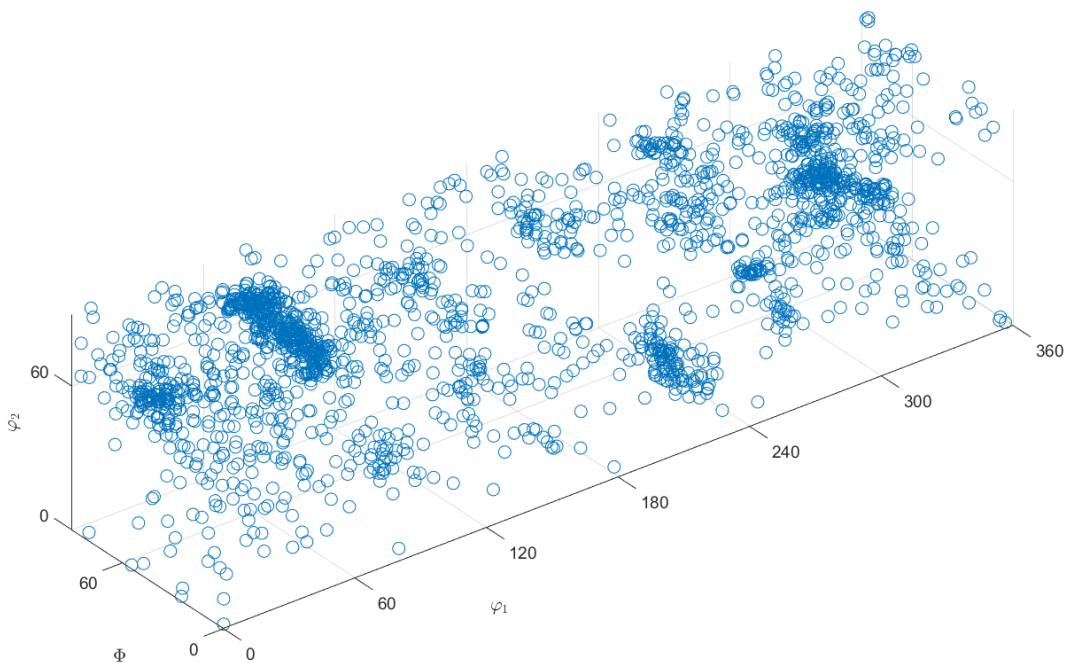


Εικόνα 33. Πολικός χάρτης  $\{111\}$  εξεταζόμενου δείγματος



Εικόνα 34. Πολικός χάρτης {111} εξεταζόμενου δείγματος

Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται περαιτέρω από τη χωρική αναπαράσταση των γωνιών Euler, όπου εντοπίζονται τόσο τυχαίες κατανομές όσο και συστάδες που υποδηλώνουν πολλούς κόκκους με ίδιο προσανατολισμό. Με χρήση κανάβου προσδιορίζεται ότι ο ιστός, πιθανόν cube, εντοπίζεται σε ποσοστό περίπου 40% της φάσης του αλουμινίου.



Εικόνα 35. Χωρική αναπαράσταση γωνιών Euler εξεταζόμενου δείγματος

Σε αυτό το σημείο ολοκληρώνεται η ερμηνεία του αρχείου, που προέκυψε από τη σάρωση EBSD, καθώς η περαιτέρω επεξεργασία και παραμετροποίηση του δεν κατέστη δυνατή λόγω της πανδημίας.

Επόμενο στάδιο είναι η κατασκευή του RVE με τα ποσοτικά και ποιοτικά δεδομένα, που προέκυψαν από την παραπάνω ανάλυση. Η διαδικασία αυτή θα γίνει μέσω του λογισμικού DREAM3D, το οποίο είναι ένα βαθμωτό λογισμικό και δομεί τη διαδικασία μέσω φίλτρων. Δηλαδή, η μέθοδος δημιουργίας αποτελείται από δέκα διαφορετικά και ανεξάρτητα λογισμικά, τα οποία αποτελούν τα φίλτρα και συνδυάζονται μέσω του DREAM3D προκειμένου να συντεθεί σταδιακά το RVE. Στόχος είναι ο συνδυασμός των πειραματικών δεδομένων από το EBSD και των βιβλιογραφικών δεδομένων προκειμένου να προκύψει ένα στατιστικά αντιπροσωπευτικό RVE που πλέον θεωρείται sRVE (statistically Representative Volume Element) ή SVE (Statistical Volume Elements), όπως αναλύεται παρακάτω.

Η αρχιτεκτονική των φίλτρων που θα χρησιμοποιηθεί παρουσιάζεται στην εικόνα 36 και αναλύεται βήμα προς βήμα. Πρόκειται για αρχιτεκτονική τριών βημάτων με πρώτο τη δημιουργία στατιστικά αντιπροσωπευτικών κατανομών μεγεθών, δεύτερο

τη σύνθεση και οίκηση του όγκου και τρίτο, την μετατροπή στους κατάλληλους τύπους αρχείων. Σημειώνεται ότι σε αυτή τη διαδικασία δεν ορίζονται οι θερμικές και μηχανικές ιδιότητες των συμμετεχουσών φάσεων, καθώς αυτό συμβαίνει σε επόμενο βήμα της διεργασίας.

|    |                             |
|----|-----------------------------|
| 01 | StatsGenerator              |
| 02 | Initialize Synthetic Volume |
| 03 | Establish Shape Types       |
| 04 | Pack Primary Phases         |
| 05 | Find Surface Features       |
| 06 | Find Feature Neighbors      |
| 07 | Match Crystallography       |
| 08 | Generate IPF Colors         |
| 09 | Write DREAM.3D Data File    |
| 10 | Export DAMASK Files         |

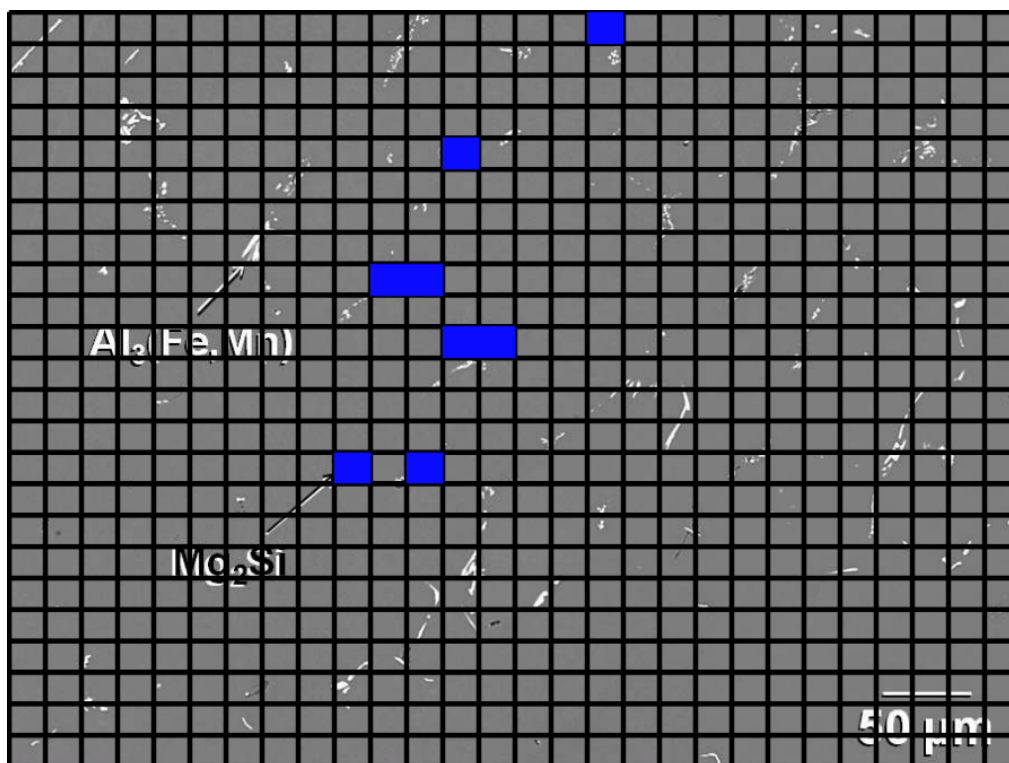
Εικόνα 36. Αρχιτεκτονική φίλτρων για δημιουργία RVE [57]

Το πρώτο βήμα είναι η χρήση του φίλτρου StatsGenerator, με το οποίο δημιουργούνται στατιστικά αντιπροσωπευτικές πληροφορίες του δείγματος προς αναπαράσταση [58]. Σε αυτό το φίλτρο παράγεται το πρώτο στοιχείο της δομής, ο κόκκος. Για τον ορισμό του απαιτείται το αναμενόμενο σχήμα, το μέσο αναμενόμενο μέγεθος και ο ορισμός συγκεκριμένου προσανατολισμού του συνόλου των κόκκων εάν υπάρχει. Στην περίπτωση που δεν υφίσταται, ο προσανατολισμός θα είναι τυχαίος.

Στο RVE της παρούσας εργασίας θα σχηματισθούν δύο φάσεις, που αφορούν στο αλουμίνιο και το  $Mg_2Si$  σε ποσοστά τυχαίας κατανομής στο δείγμα 98% και 2% αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι τα ποσοστά αφορούν τη συμμετοχή ανά επίπεδο του όγκου και όχι τη συμμετοχή στον συνολικό όγκο, η οποία θα είναι μεγαλύτερη λόγω της τρισδιάστατης φύσης του. Το εύρος των ποσοστών προέκυψε μέσω της τεχνικής του κανάβου από σαρώσεις SEM της βιβλιογραφίας, όπως φαίνεται στην εικόνα 37.

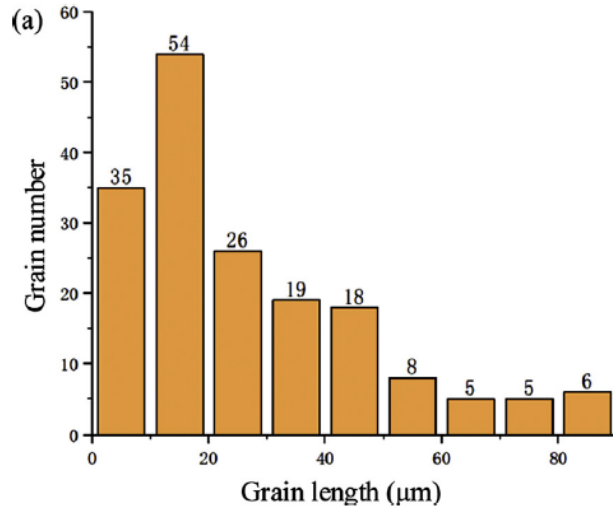


Η α φάση  $Al_3(Fe,Mn)$  δε θα ληφθεί υπόψη, καθώς το εξεταζόμενο δείγμα της εταιρείας ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ. Α.Ε. την περιέχει σε ελάχιστο ποσοστό. Τα παραπάνω δεδομένα επιβεβαιώθηκαν από σύγκριση με πειραματικά ιστορικά δεδομένα της εταιρείας και τα τελικά ποσοστά διαμορφώθηκαν με βάση την σχετική εμπειρία.

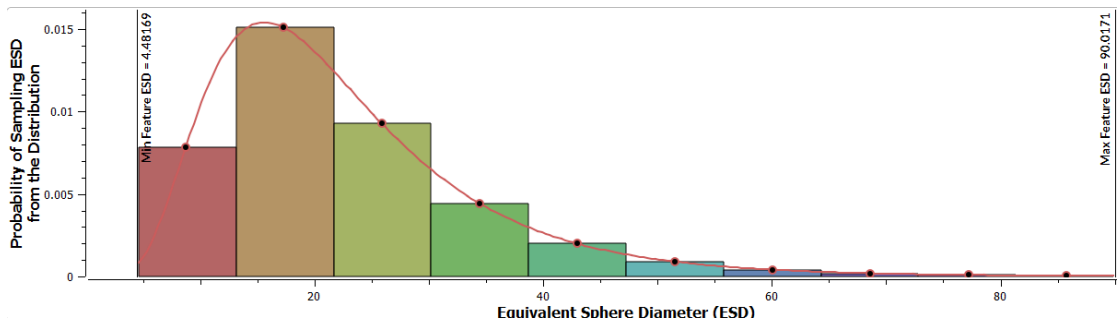


Εικόνα 37. Κάναβος σε έλασμα AA5182-O

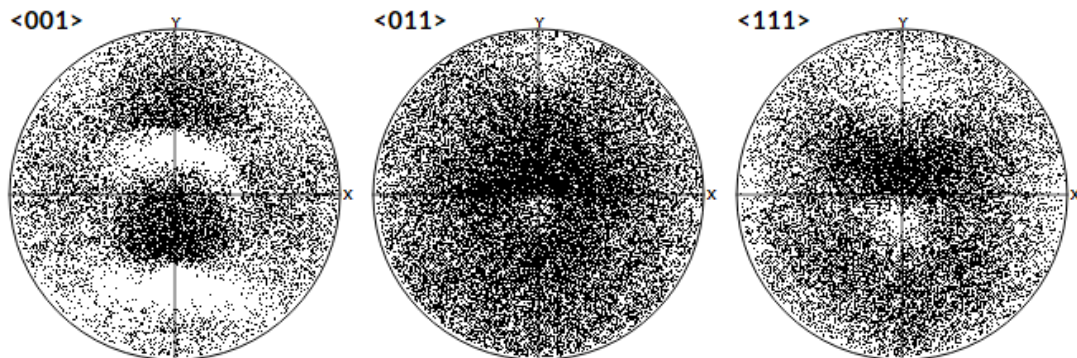
Το μέσο μήκος κόκκου της φάσης του αλουμινίου στη βιβλιογραφία είναι 10-20μm με κατανομή, όπως εμφανίζεται στην εικόνα 38 [59]. Στοχεύοντας στην αναπαράσταση της παρακάτω κατανομής, χρησιμοποιείται λογαριθμικοκανονική κατανομή για τη δημιουργία των στατιστικών δεδομένων. Επιπλέον, από την προηγούμενη ανάλυση προέκυψε η ύπαρξη RCube και, συνεπώς, τα δεδομένα στο StatsGemerator τροποποιήθηκαν αντιστοίχως προκειμένου να παραχθεί αυτός ο ιστός, όπως φαίνεται στις ακόλουθες εικόνες. Τέλος, το σχήμα κόκκου επιλέχθηκε ως κατά προσέγγιση κυρίαρχο ισαξονικό αντί για κυρίαρχο ελασμένο, καθώς έχει υποστεί ανακρυστάλλωση.



Εικόνα 38. Βιβλιογραφική κατανομή μεγέθους κόκκου αλουμινίου σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O [59]

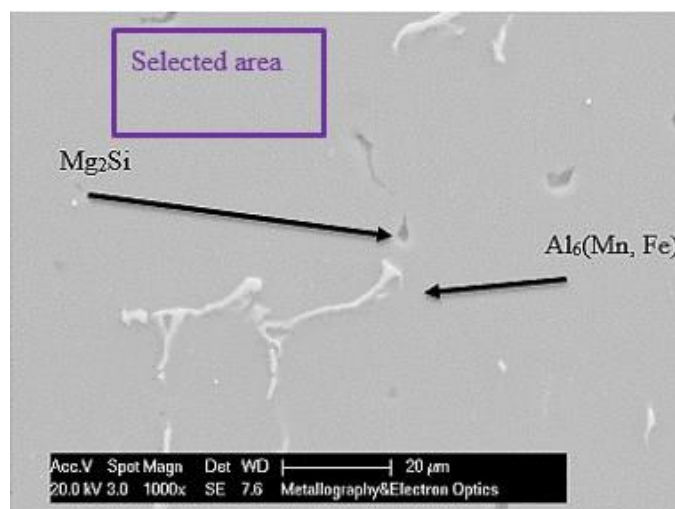


Εικόνα 39. Κατανομή μεγέθους κόκκου αλουμινίου σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O από StatsGenerator

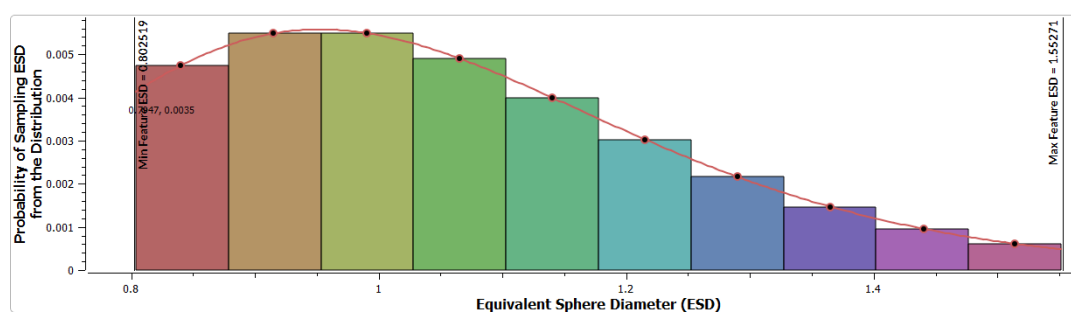


Εικόνα 40. Χάρτες ODF από StatsGenerator

Για το  $Mg_2Si$  ακολουθήθηκε αντίστοιχη διαδικασία χωρίς όμως να ορισθεί ιστός και με μέσο μέγεθος κόκκου  $1\mu m$  [60].



Εικόνα 41. Μέγεθος φάσης  $Mg_2Si$  [60]



Εικόνα 42. Κατανομή μεγέθους κόκκου  $Mg_2Si$  σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O από το StatsGenerator

Με την ολοκλήρωση της παραπάνω παραμετροποίησης ακολουθεί το φίλτρο Initialize Synthetic Volume, το οποίο είναι το πρώτο του δευτέρου βήματος, όπως αυτό αναφέρθηκε παραπάνω. Σε αυτό το φίλτρο ορίζονται ένας άδειος όγκος μέσω των διαστάσεων, οι συντεταγμένες και η ανάλυση του RVE [61]. Στην προκειμένη περίπτωση ορίστηκε όγκος αδιάστατου μεγέθους  $80 \times 80 \times 80$ , καθώς αποτελεί έναν ικανοποιητικό συμβιβασμό μεταξύ ανάλυσης με τιμή ακμής 2 και πολυπλοκότητας του RVE. Αυτό το μέγεθος δημιουργεί όγκο  $80 \times 80 \times 80$  κύβων με μήκος πλευράς 2 μεγέθους μήκους. Η διάσταση αυτή επιλέχθηκε έπειτα από 5 δοκιμές με

διαφορετικές παραμέτρους, καθώς με αυτόν τον τρόπο επιτεύχθηκε ισορροπία μεταξύ της ανάλυσης της μικροδομής και των απαιτούμενων υπολογιστικών πόρων.

Ακολουθούν τα παρακάτω φίλτρα για την ολοκλήρωση του δευτέρου βήματος. Ορισμένα εξ' αυτών απαιτούν την εισαγωγή παραμέτρων από το χρήστη ενώ άλλα είναι αυτόνομα:

- Establish Shape Types προκειμένου να προσδιορισθεί το σχήμα των κόκκων της κάθε φάσης ως ελλειψοειδές [62]
- Pack Primary Phases προκειμένου να δημιουργηθούν οι κόκκοι, να τοποθετηθούν στον όγκο και να δομηθεί η εσωτερική αρχιτεκτονική της βάσης δεδομένων, που αποθηκεύει τις ιδιότητες και τα στοιχεία του όγκου [51], [63]
- Find Surface Features προκειμένου να προσδιορισθεί ποιοι κόκκοι αγγίζουν τις άκρες του όγκου [64]
- Find Feature Neighbors προκειμένου να προσδιορισθούν οι γειτονικοί κόκκοι του κάθε κόκκου [65]
- Match Crystallography προκειμένου να τροποποιηθούν οι τυχαίοι προσανατολισμοί με στόχο τη δημιουργία ιστού [66]
- Generate IPF Colors προκειμένου να είναι δυνατή η οπτική αναπαράσταση των προσανατολισμών μέσω χαρτών IPF [67]

Τέλος, ακολουθεί το τρίτο βήμα που αφορά τη δημιουργία κατάλληλων τύπων αρχείων και αποτελείται από τα δύο ακόλουθα φίλτρα:

- Write DREAM.3D Data File
- Export DAMASK Files

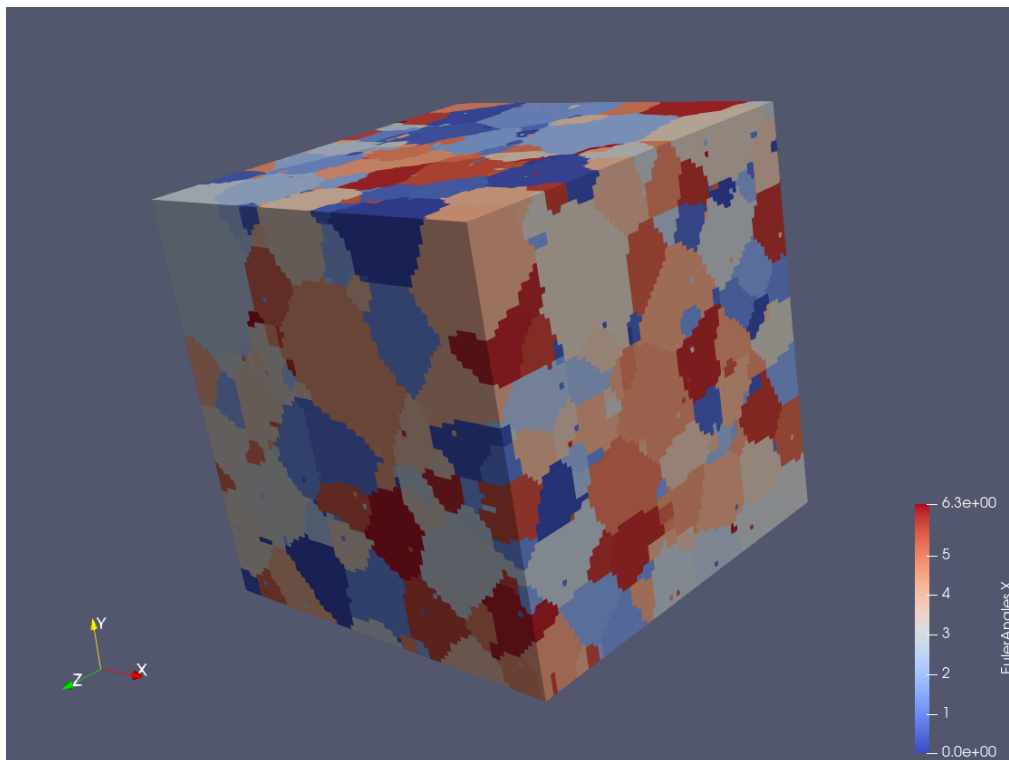
Σε αυτό το σημείο ολοκληρώνεται η δημιουργία και η παραμετροποίηση του RVE και απομένει η ρύθμιση του DAMASK.

Το RVE που δημιουργήθηκε θεωρείται sRVE για δύο λόγους. Ο πρώτος αφορά στις πηγές δεδομένων. Συγκεκριμένα, όπως προαναφέρθηκε, η ύπαρξη κρυσταλλογραφικού ιστού επιβεβαιώθηκε από το βιομηχανικό δείγμα και το πειραματικό διάγραμμα ODF είναι πανομοιότυπο με αυτό του RVE. Επιπλέον, το

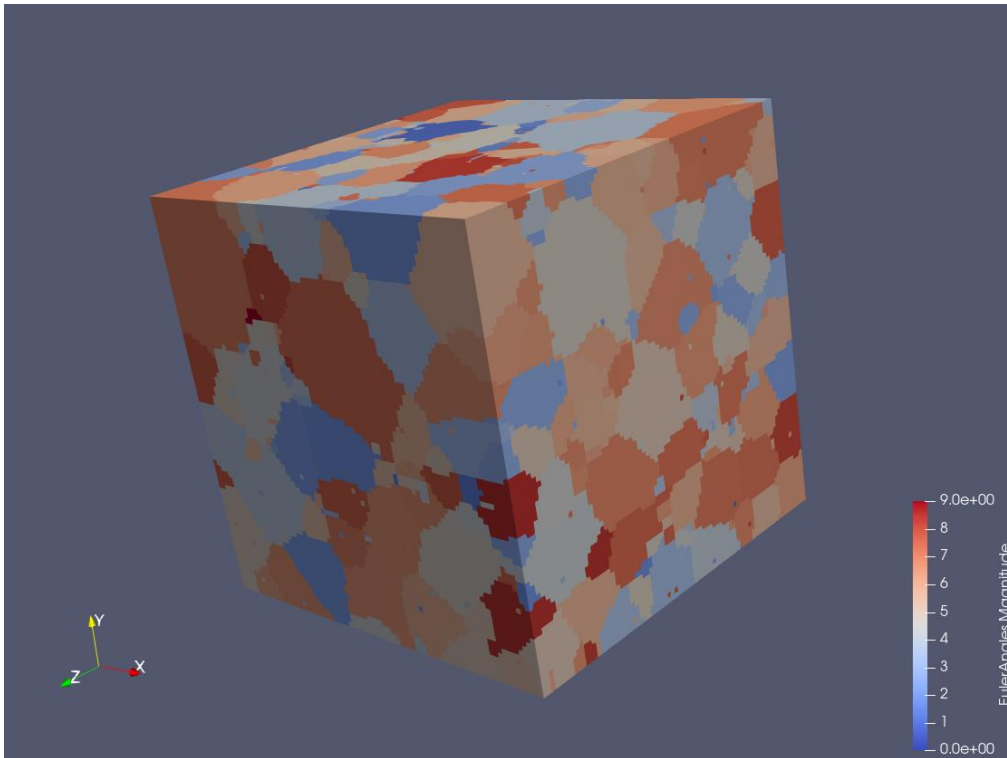
μέγεθος των κόκκων, το οποίο δεν ήταν εφικτό να προσδιορισθεί πειραματικά λόγω της πανδημίας, στο RVE ορίσθηκε με βάση βιβλιογραφικές κατανομές μεγέθους. Τέλος, η ποσοτική κατανομή των φάσεων προσδιορίσθηκε με τη μέθοδο του κανάβου.

Ο δεύτερος αφορά στην επάρκεια του όγκου, καθώς αποτελείται από αρκετούς κόκκους και το μέγεθος της κάθε πλευράς του επαρκεί για τη διαδιάστατη τοποθέτηση σχεδόν τεσσάρων παρατεταγμένων κόκκων α φάσης ή σχεδόν 80 β φάσης. Συνεπώς, στον όγκο περιέχονται εκατοντάδες κόκκοι αλλά αξιόπιστα αποτελέσματα έχουν επιτευχθεί στη βιβλιογραφία με λιγότερους κόκκους [68].

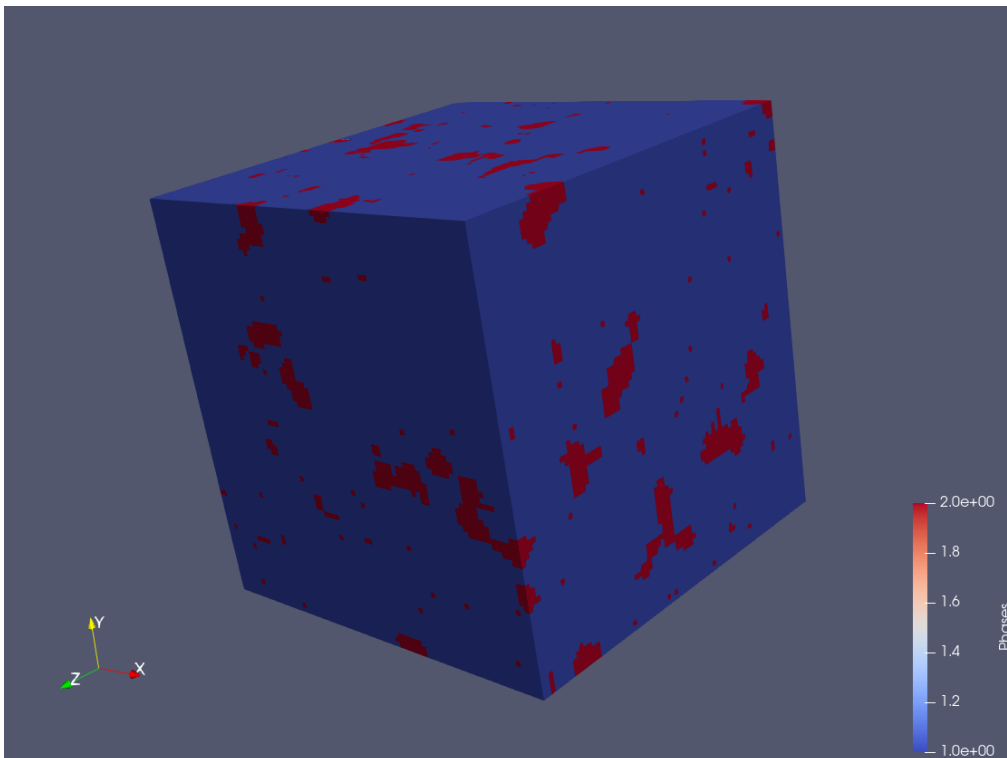
Το RVE που δημιουργήθηκε παρουσιάζεται στις παρακάτω εικόνες.



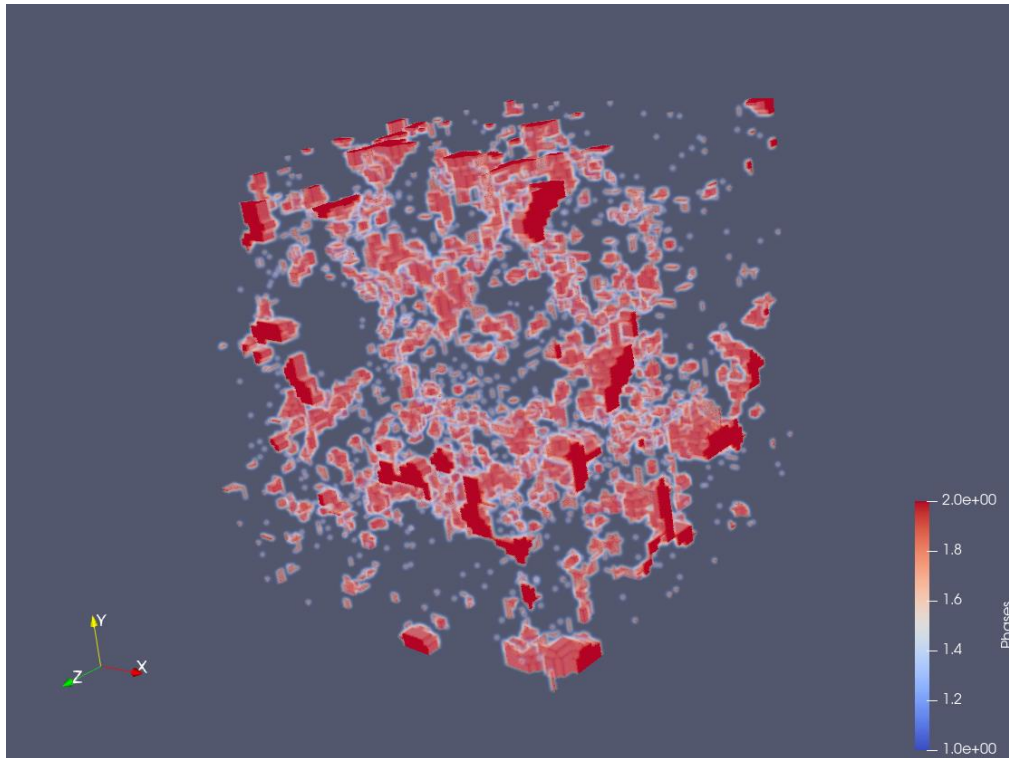
Εικόνα 43. Προσανατολισμός κόκκων αναφορικά με τον άξονα x



Εικόνα 44. Γενικός προσανατολισμός κόκκων



Εικόνα 45. Οι δύο φάσεις στην επιφάνεια του όγκου



Εικόνα 46. Η φάση β στον συνολικό όγκο

### 3.2 Παράμετροι υλικών

Ο όγκος προσομοίωσης έχει πλέον δημιουργηθεί και απομένει ο ορισμός των μηχανικών ιδιοτήτων των φάσεων, που περιλαμβάνει. Συγκεκριμένα, για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς του RVE από το DAMASK, απαιτείται υποχρεωτικά ο προσδιορισμός των νόμων ελαστικής και πλαστικής παραμόρφωσης για την κάθε συμμετέχουσα φάση [38]. Προαιρετικά, μπορεί να ορισθεί και η θερμική συμπεριφορά. Ωστόσο, στην παρούσα εργασία δε θα ενεργοποιηθεί αυτός ο μηχανισμός, λόγω περιορισμών υπολογιστικής ισχύος.

#### 3.2.1 Νόμοι και παράμετροι ελαστικής παραμόρφωσης

Στο RVE, που δημιουργήθηκε, υπάρχουν δύο φάσεις και, συνεπώς, δύο σύνολα παραμέτρων ελαστικής παραμόρφωσης. Επιλέγεται ο νόμος του Hooke για την ερμηνεία της ελαστικής συμπεριφοράς των κόκκων, ο οποίος έχει την γενικευμένη μορφή όπως παρουσιάζεται στην εξίσωση 16 [38].

$$\mathbf{S} = \mathbf{C} : \mathbf{E}$$

Εξίσωση 16. Γενικευμένος νόμος του Hooke [38]

Στην παραπάνω εξίσωση η δεύτερη τάση Piola-Kirchhoff τάση συνδέεται με την τάση Green-Lagrange  $E$  μέσω της παραμέτρου ελαστικής σκληρότητας  $C$ , που συνδέει τη παραμόρφωση με την κρυσταλλική δομή όπως αναλύθηκε [38].

Δεδομένου ότι πρόκειται για δύο φάσεις, που κρυσταλλώνονται στο κυβικό fcc, για τον προσδιορισμό της ελαστικής συμπεριφοράς απαιτούνται μόνο οι τρεις ελαστικές σταθερές  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  και  $C_{44}$  καθώς ισχύει ότι  $C_{11} = C_{22} = C_{33}$ ,  $C_{12} = C_{13} = C_{23}$  και  $C_{44} = C_{55} = C_{66}$ . [69]

|          | Αλουμίνιο [70] | Mg <sub>2</sub> Si [71] |
|----------|----------------|-------------------------|
| $C_{11}$ | 10,73 GPa      | 12,1 GPa                |
| $C_{12}$ | 6,08 GPa       | 2,2 GPa                 |
| $C_{44}$ | 2,83 GPa       | 4,64 GPa                |

Πίνακας 5. Ελαστικές σταθερές αλουμινίου και Πυριτικού Μαγνησίου

### 3.3 Παράμετροι και συνθήκες προσομοιώσεων

Τελικό στάδιο στην παραμετροποίηση μίας προσομοίωσης κρυσταλλικής πλαστικότητας είναι ο ορισμός της κάθε είδους καταπόνησης. Συγκεκριμένα, στο DAMASK μπορούν να ορισθούν συνθήκες φορτίου, θερμοκρασίας και αστοχίας [38]. Ωστόσο, στην παρούσα εργασία εξετάζονται μόνο συνθήκες φορτίου.

#### 3.3.1 Συνθήκες φορτίου

Για τον ορισμό του φορτίου στην περίπτωση του εφελκυσμού κατά τον άξονα  $x$ , απαιτείται ο ορισμός του επιλύτη, ο οποίος ορίζεται σε φασματικό επιλύτη, ο ορισμός της τάσης και κατεύθυνσή της, η οποία ορίζεται ως 1,0e-3MPa κατά τον άξονα  $x$ , και ο ορισμός του χρόνου δοκιμής, ο οποίος ορίζεται σε δύο αλληπάλληλες δοκιμές των 10s και 60s. Τέλος, πρέπει να ορισθεί ο αριθμός των επιμέρους βημάτων, που θα εφαρμοσθεί η τάση στον όγκο, ο οποίος ορίζεται σε 40 και 60 αντίστοιχα ανά δοκιμή [72]. Ο λόγος ορισμού δύο αλληπάλληλων δοκιμών είναι, στην περίπτωση που το υλικό αστοχήσει σε μικρό χρονικό διάστημα, να αστοχήσει στην πρώτη δοκιμή, ώστε



να διακοπεί η προσομοίωση και να μην σπαταληθούν πόροι για την χρονοβόρα δεύτερη.

### 3.3.2 Συνθήκες θερμοκρασίας και καταστροφής

Δεν ορίζονται συνθήκες θερμοκρασίας και καταστροφής καθώς, στόχος της παρούσας εργασίας είναι η απόπειρα δημιουργίας ψηφιακού μοντέλου για την πρόβλεψη του κρυσταλλογραφικού ιστού και δυνητικά των προκυπτουσών μηχανικών ιδιοτήτων έπειτα από τη μηχανική δοκιμή του μονοαξονικού εφελκυσμού.

## 4 Διεξαγωγή προσομοιώσεων & Προετοιμασία αποτελεσμάτων

Η διεξαγωγή προσομοιώσεων και η προετοιμασία των αποτελεσμάτων έγινε με χρήση του DAMASK 3.0.0-alpha5-1 σε Python 3.8.10 σε υπολογιστικό περιβάλλον με τα παρακάτω χαρακτηριστικά και παραμέτρους:

|                                  |  |
|----------------------------------|--|
| Λειτουργικό σύστημα              | Ubuntu 20.04.3 LTS βασισμένο σε Linux  |
| Υπολογιστικό περιβάλλον          | Oracle Virtual Box Virtual Machine (VM) 6.1.32 r149290 (Qt5.6.2) σε Windows 10 Professional 19043.1466 |
| Συνολικοί επεξεργαστικοί πυρήνες | 6 για τη VM  |
| Ενεργοί επεξεργαστικοί πυρήνες   | 4 για το DAMASK  |
| RAM                              | 8192MB για το VM και το DAMASK   |
| Μέσο αποθήκευσης                 | Virtual Disk Drive (VDI) σε SATA III SSD   |

Πίνακας 6. Χαρακτηριστικά και παράμετροι υπολογιστικού περιβάλλοντος

Ο συνολικοί υπολογιστικοί χρόνοι της τελικής διαμορφωμένης προσομοίωσης παρατίθενται στον ακόλουθο πίνακα:

|                            |           |
|----------------------------|-----------|
| Δημιουργία RVE στο DREAM3D | ~ 4 λεπτά |
| Προσομοίωση στο DAMASK     | ~ 3 ώρες  |
| Επεξεργασία στο DAMASK     | ~ 2 λεπτά |

Πίνακας 7. Υπολογιστικοί χρόνοι σε λεπτά

## 5 Αποτελέσματα & Συζήτηση επί των αποτελεσμάτων

---

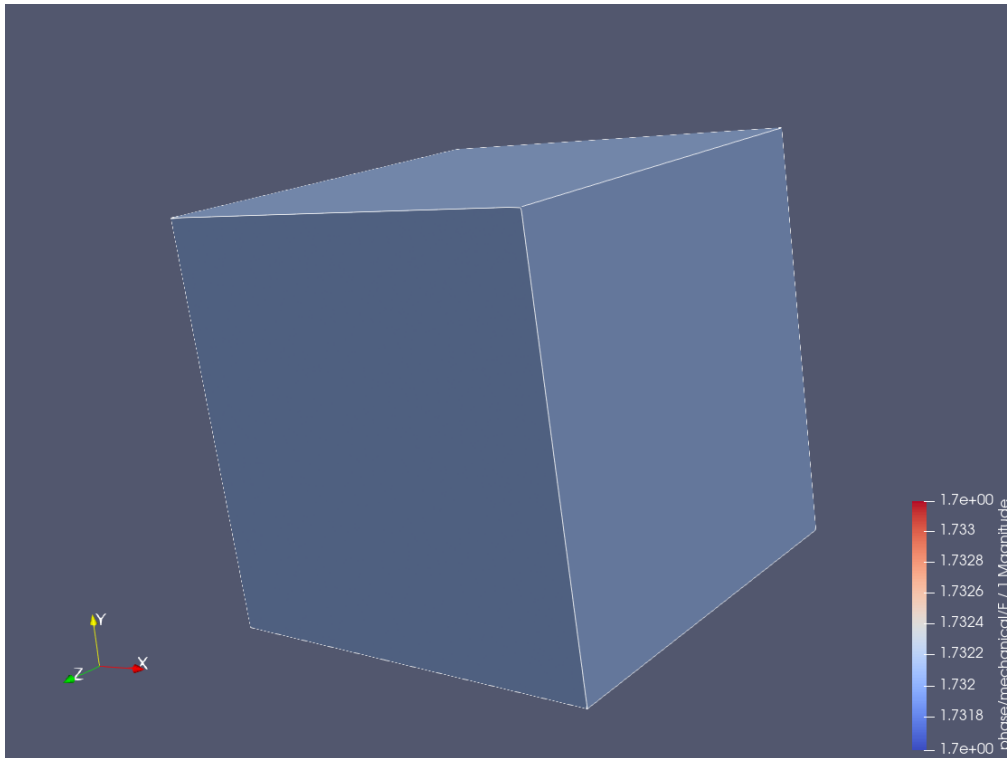
### 5.1 Παρουσίαση και σχολιασμός αποτελεσμάτων και περιπτωσιολογικής μελέτης

Σε αυτό τη σημείο έχει πλέον δημιουργηθεί ένα sRVE (Statistical Representative Volume Element) με ποιοτικά δεδομένα από την ανάλυση EBSD και τη σάρωση του μικροσκοπίου SEM και ποσοτικά από τη βιβλιογραφία. Αυτό έχει υποβληθεί σε προσομοίωση δοκιμής μηχανικού εφελκυσμού στον άξονα  $x$ , με αποτέλεσμα ο όγκος να έχει παραμορφωθεί και να έχει προκύψει ένας νέος κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός, ενώ έχουν αναπτυχθεί και τάσεις μεταξύ των κόκκων.

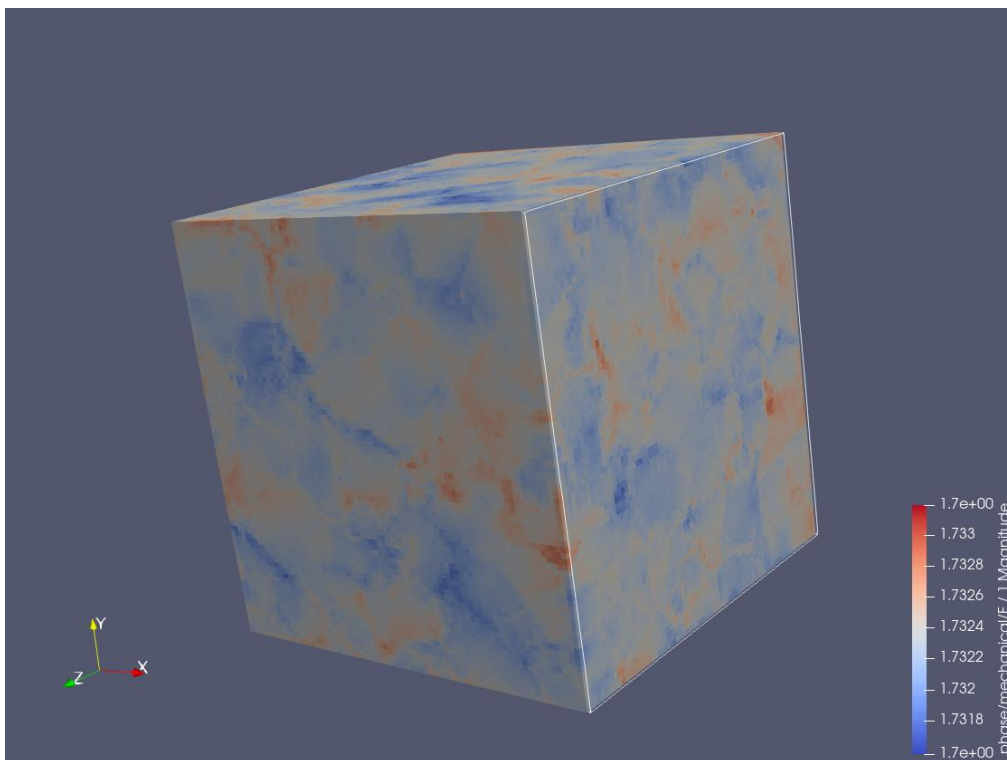
Το DAMASK προσφέρει τη δυνατότητα, μεταξύ άλλων, της οπτικοποίησης αυτών των μεταβολών στον δοκιμαζόμενο όγκο μαζί με την εξαγωγή ποσοτικών αποτελεσμάτων.

Συγκεκριμένα, για τα ποσοτικά αποτελέσματα, ως πακέτο προσομοίωσης μηχανικών δοκιμών, το DAMASK υπολογίζει σε κάθε βήμα (increment) τις τάσεις στα όρια όλων των κόκκων σε όλες τις διευθύνσεις και την παραμόρφωση, που αυτές επιφέρουν. Προκύπτουν δηλαδή, για κάθε μετρούμενο μέγεθος, τρεις τετραδιάστατοι πίνακες με τον καθένα, εξωτερικά, να αφορά στη μία διεύθυνση συναρτήσεως του χρόνου και, εσωτερικά, να αφορά ξανά στην κάθε διεύθυνση FFT, όπως προκύπτει από τη μεθοδολογία, που αναλύθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο.

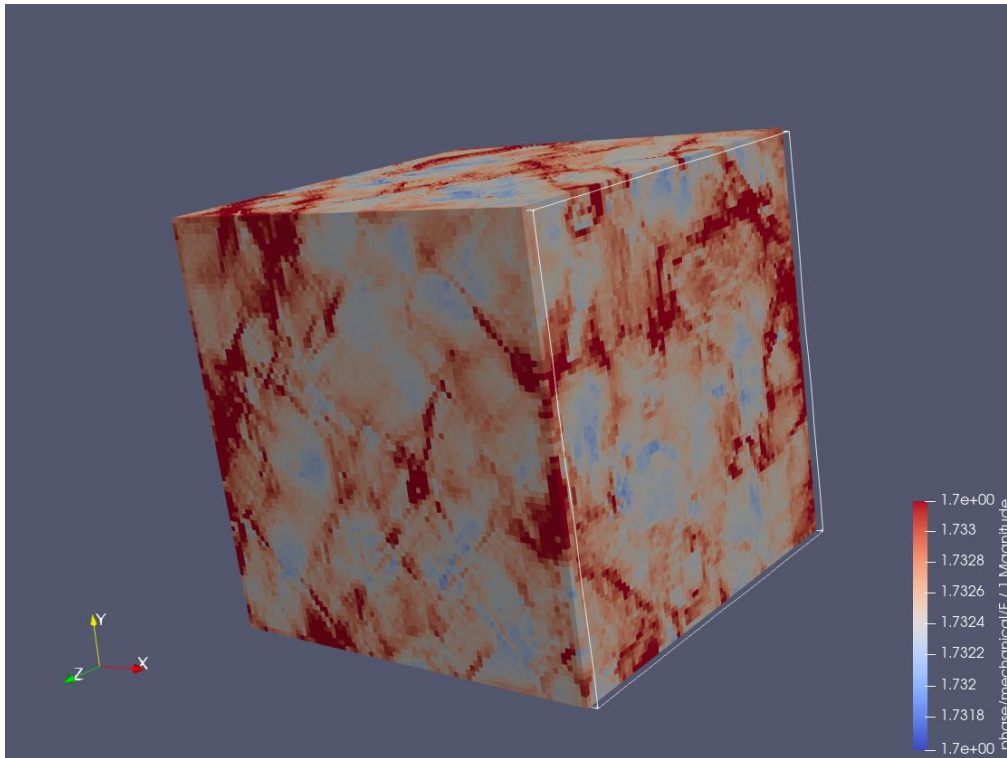
Τα ποιοτικά αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω. Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται αρχικά οι περιοχές παραμόρφωσης και το εύρος αυτών. Με μπλε, όπως φαίνεται και στην κλίμακα, αναπαρίστανται οι αρχικές περιοχές και με κόκκινο αυτές που έχουν παραμορφωθεί στο μέγιστο βαθμό προκαλώντας διαρροή, ενώ οι ενδιάμεσες καταστάσεις απεικονίζονται από τα ενδιάμεσα χρώματα. Το πλέγμα γύρω από τον όγκο αναπαριστά το περίγραμμα του αρχικού όγκου πριν την έναρξη της δοκιμής.



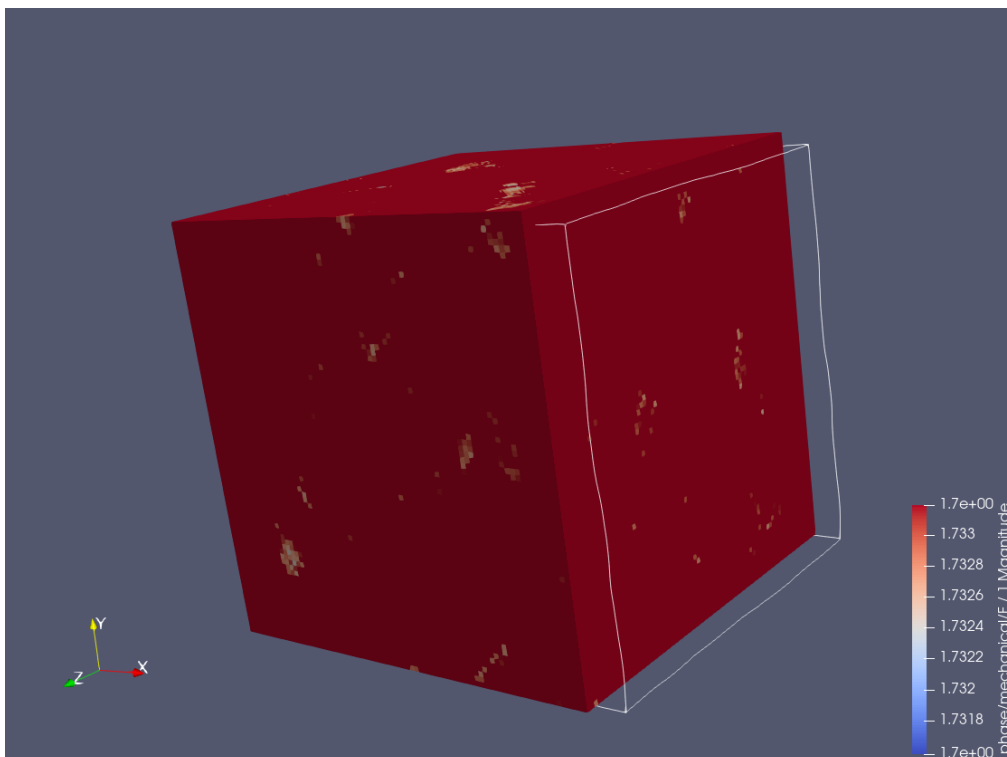
Εικόνα 47. Παραμόρφωση στο βήμα 4/100



Εικόνα 48. Παραμόρφωση στο βήμα 24/100



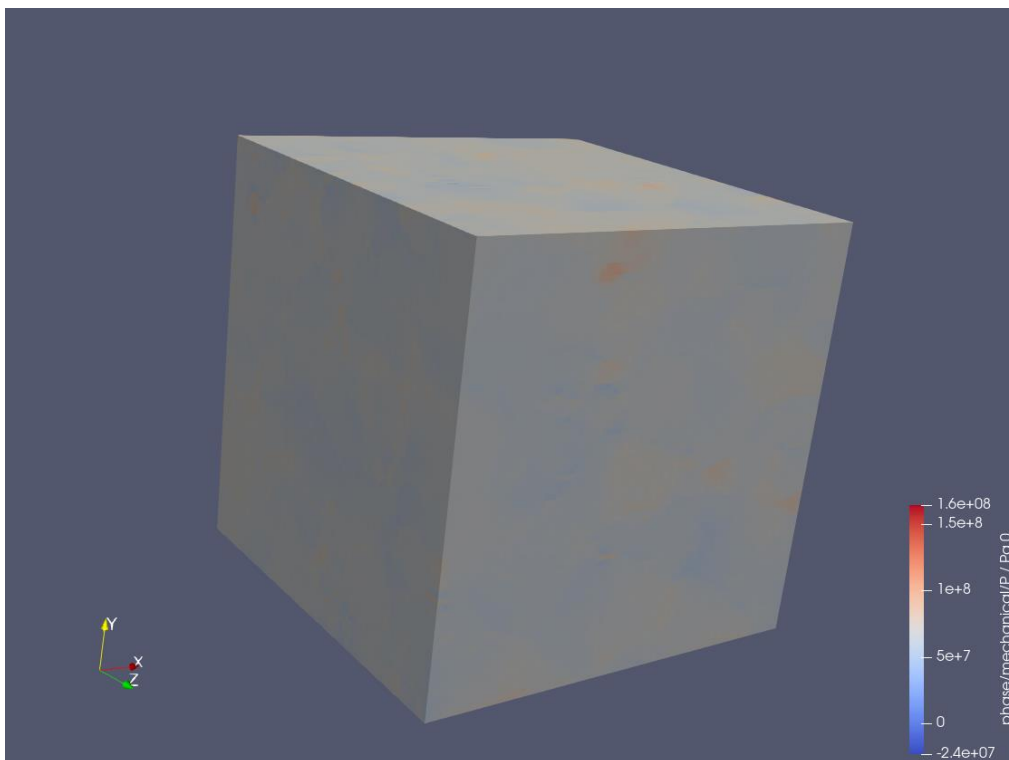
Εικόνα 49. Παραμόρφωση στο βήμα 48/100



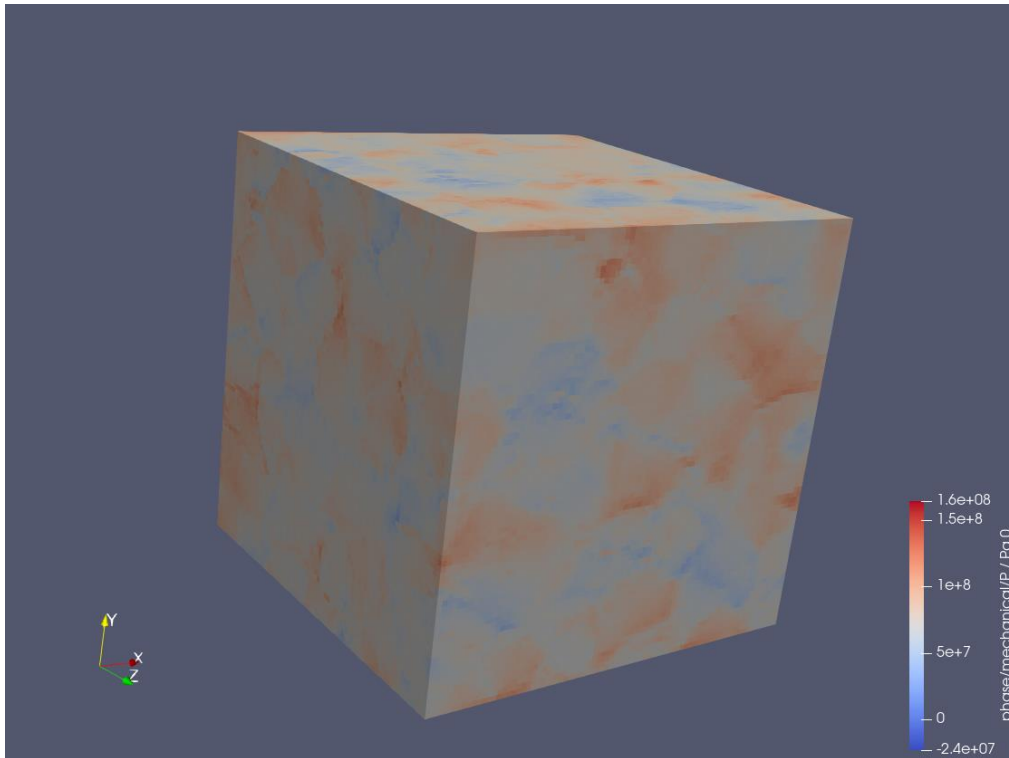
Εικόνα 50. Παραμόρφωση στο βήμα 100/100

Παρατηρείται ότι ήδη από το μέσο της δοκιμής η διαρροή έχει επέλθει και το υλικό έχει σχεδόν αστοχήσει.

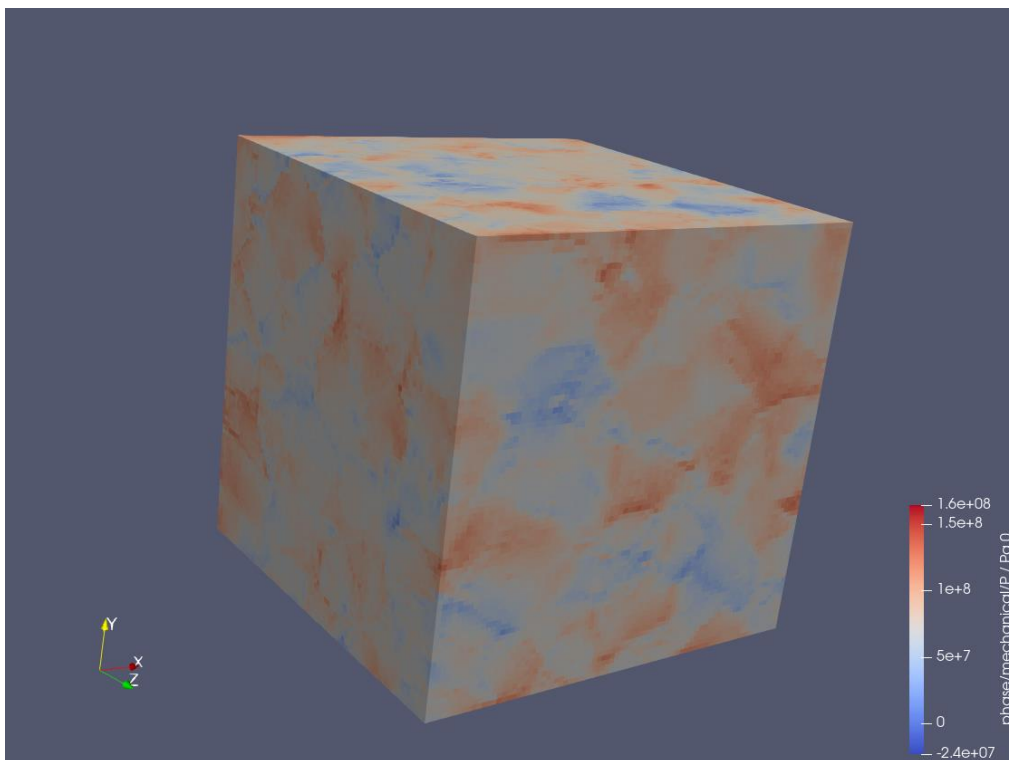
Ακολουθεί η παράθεση των αποτελεσμάτων της μηχανικής τάσης (Engineering Stress - 1<sup>st</sup> Piola-Kirchhoff Stress), τα οποία απεικονίζονται με αντίστοιχο τρόπο με μονάδα μέτρησης την Pascal. Όπως είναι αναμενόμενο από τα προηγούμενα δεδομένα, η τάση λίγο πριν τη μέση της δοκιμής σταθεροποιείται υποδεικνύοντας τη διαρροή και αστοχία του υλικού.



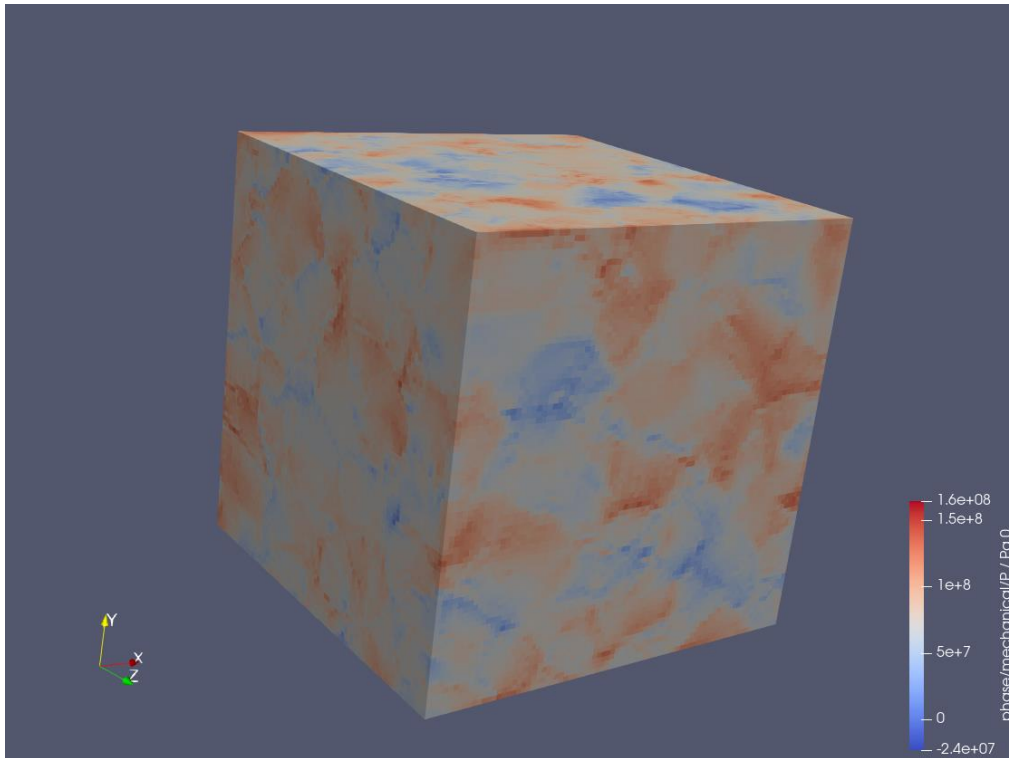
Εικόνα 51. Τάση στον x άξονα στο βήμα 4/100



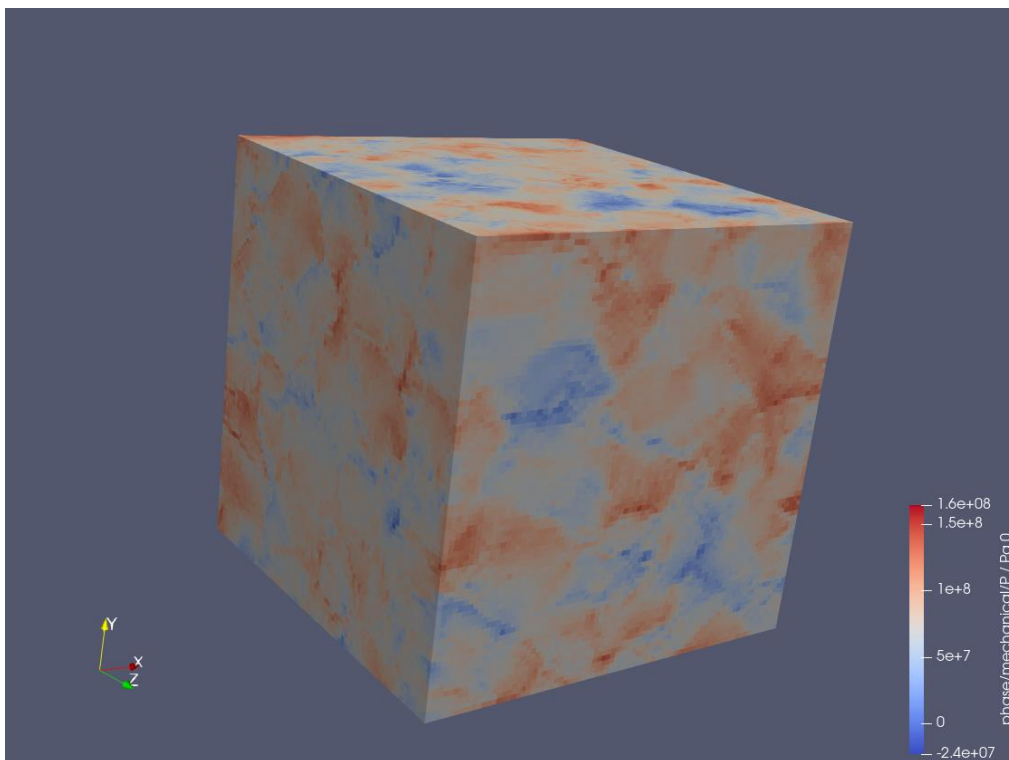
Εικόνα 52. Τάση στον x άξονα στο βήμα 8/100



Εικόνα 53. Τάση στον x άξονα στο βήμα 12/100

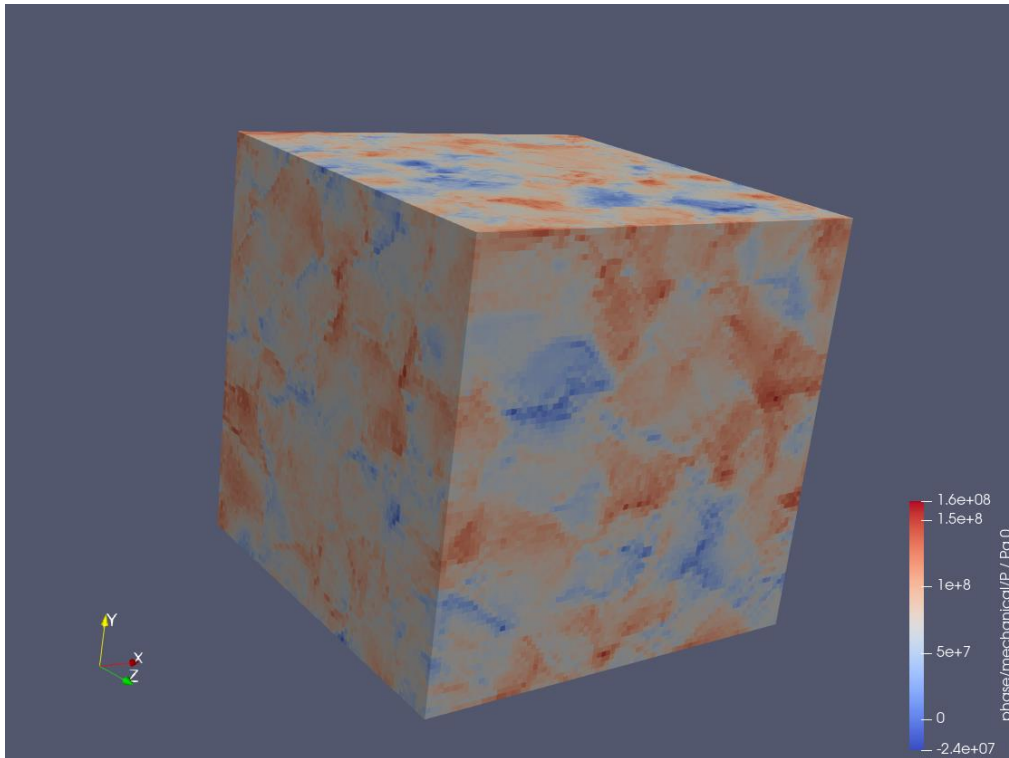


Εικόνα 54. Τάση στον x άξονα στο βήμα 16/100

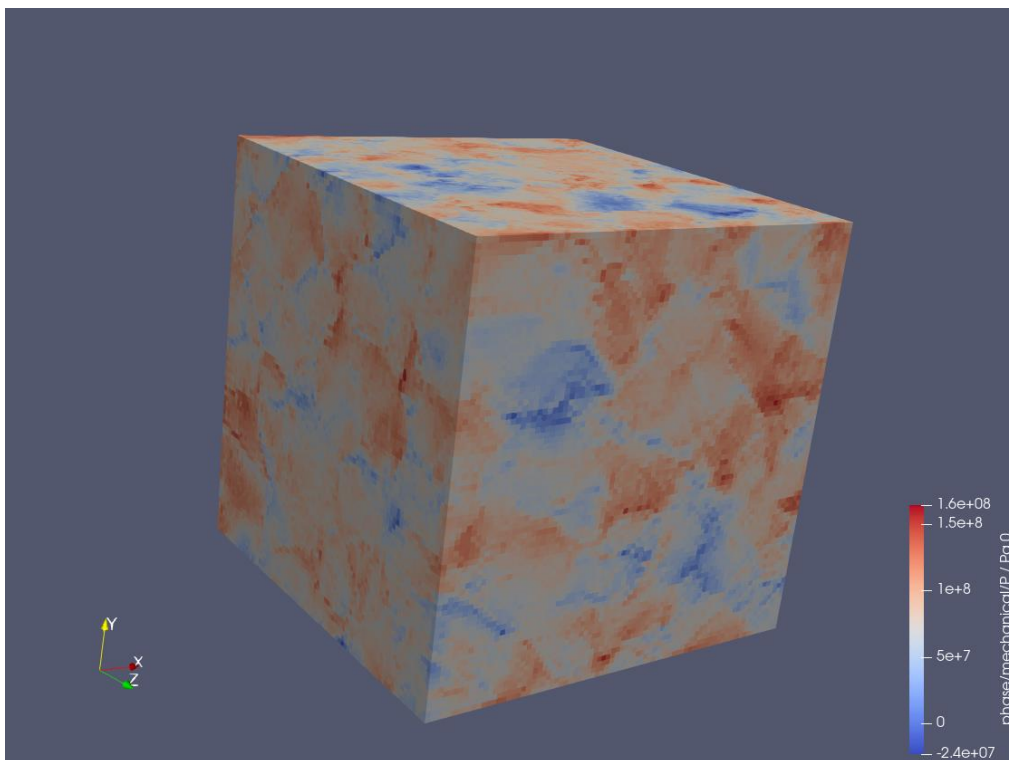


Εικόνα 55. Τάση στον x άξονα στο βήμα 28/100

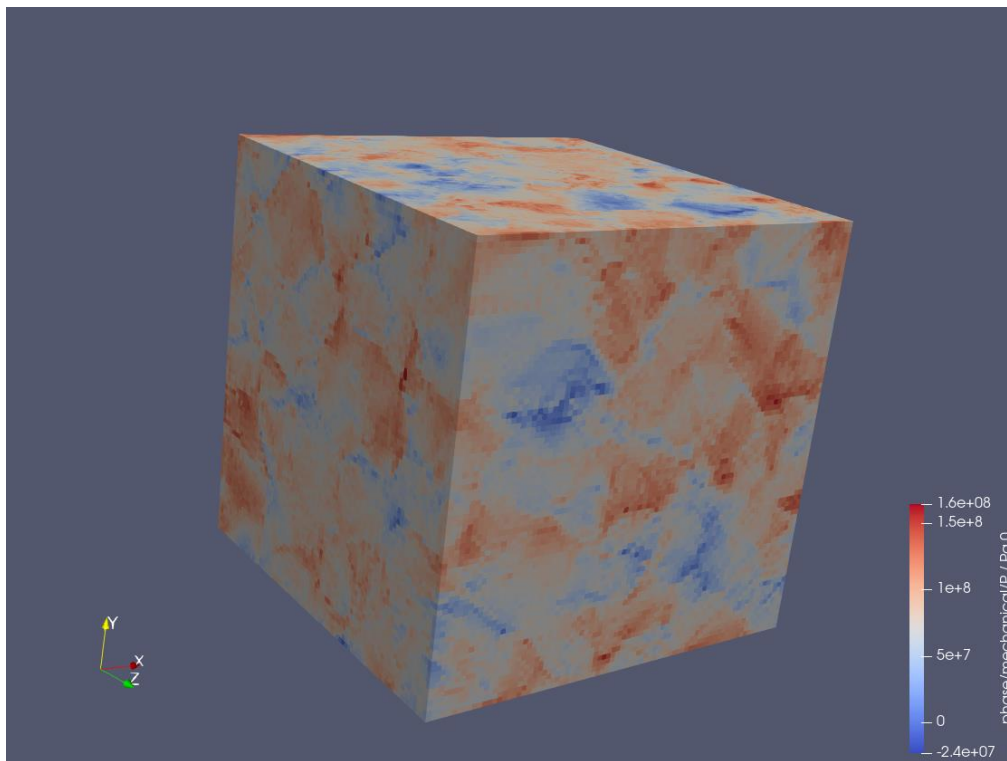




Εικόνα 56. Τάση στον x άξονα στο βήμα 60/100



Εικόνα 57. Τάση στον x άξονα στο βήμα 80/100



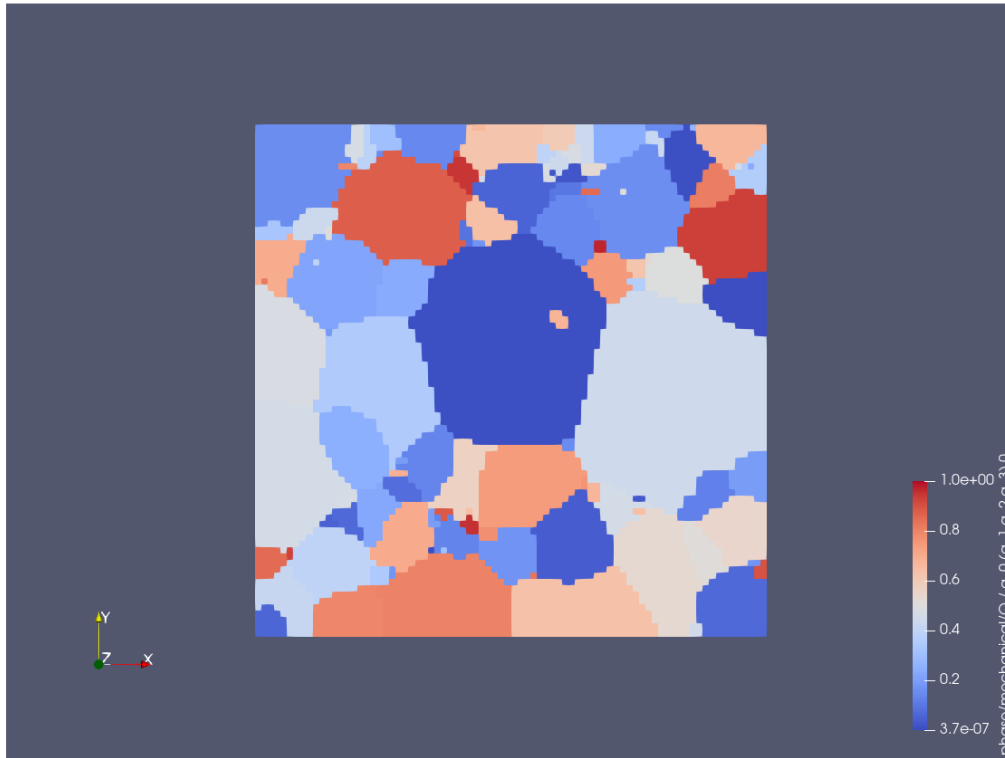
Εικόνα 58. Τάση στον x άξονα στο βήμα 100/100

Παρατηρείται και πάλι ότι από το μέσο της δοκιμής οι τάσεις αρχίζουν και σταθεροποιούνται υποδεικνύοντας την αδυναμία του υλικού να αντεπεξέλθει πλέον στη δοκιμή.

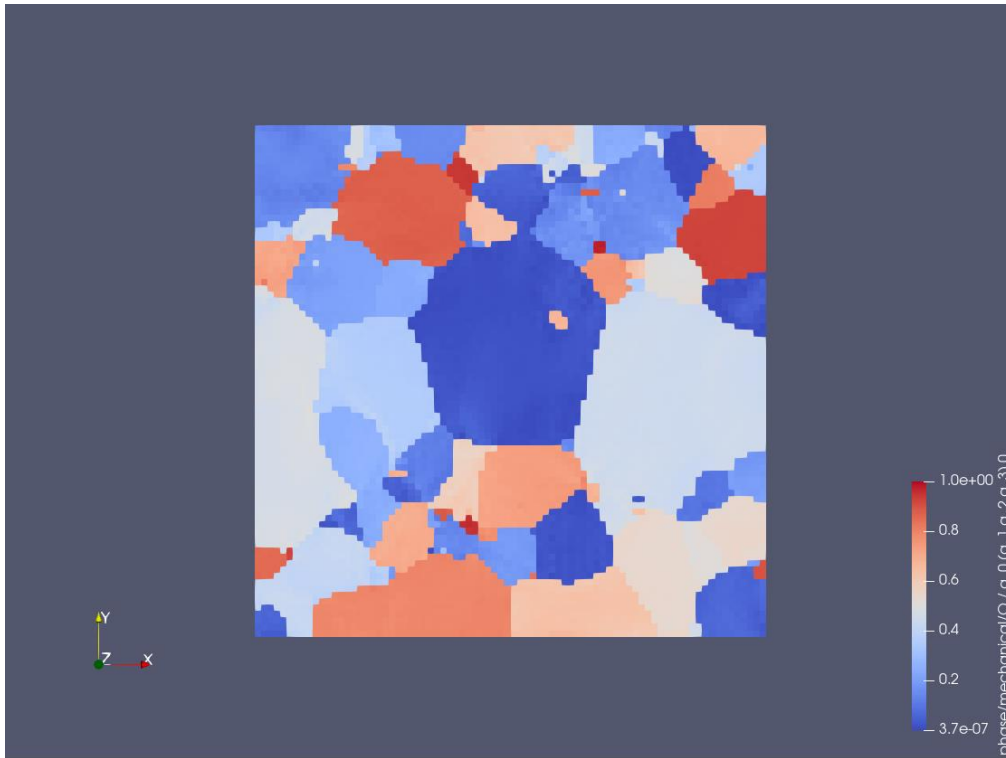
Στην παραμόρφωση δεν αναφέρεται μονάδα μέτρησης, καθώς πρόκειται για αδιάστατο μέγεθος, αφού οι διαστάσεις του αρχικού όγκου είναι αδιάστατες. Αντ' αυτού, αναφέρεται παραμόρφωση επί τις εκατό του αρχικού όγκου στην εξεταζόμενη διεύθυνση.

Τέλος, στόχος είναι η ερμηνεία του κρυσταλλογραφικού ιστού. Συγκεκριμένα, η προσομοίωση έκανε χρήση ενός sRVE με ιστό RCube βασισμένο στη σάρωση EBSD του δείγματος και δεδομένων, που παραχωρήθηκαν από την ΕΛ.Κ.Ε.ΜΕ Α.Ε. (στοιχεία από Διδακτορική Διατριβή της υποψήφιας Διδάκτορος κ. Σ. Παπαδοπούλου) Ωστόσο, λόγω της μικρής μακροσκοπικής τάσης, που εφαρμόζεται, δεν αναμένεται σημαντική μεταβολή του ιστού. Θα είναι όμως ορατή η πορεία μετασχηματισμού αυτού και θα είναι δυνατή η ερμηνεία της εξελιγμένης μορφής του. Σημειώνεται ότι η μικρή μακροσκοπική τάση εφαρμόζεται τόσο λόγω

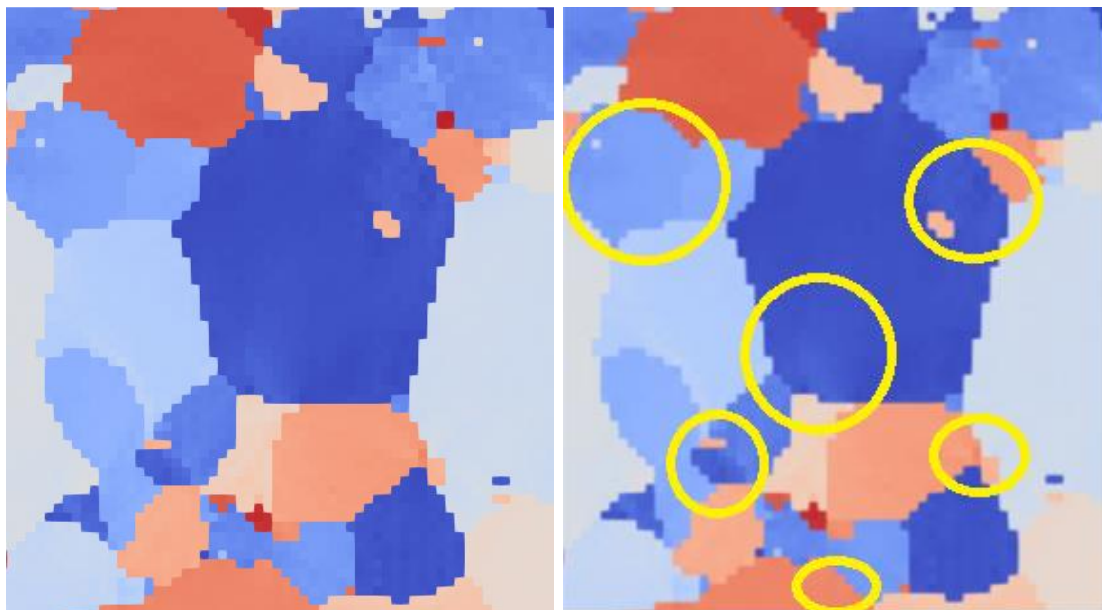
περιορισμένων υπολογιστικών πόρων και λόγω της επάρκειάς της για την πρόβλεψη μηχανικών ιδιοτήτων. Αυτές είναι και το ζητούμενο στις περισσότερες μελέτες κρυσταλλικής πλαστικότητας και αποτελούν τον απώτερο στόχο της εργασίας.



Εικόνα 59. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα x πριν την προσομοίωση δοκιμής



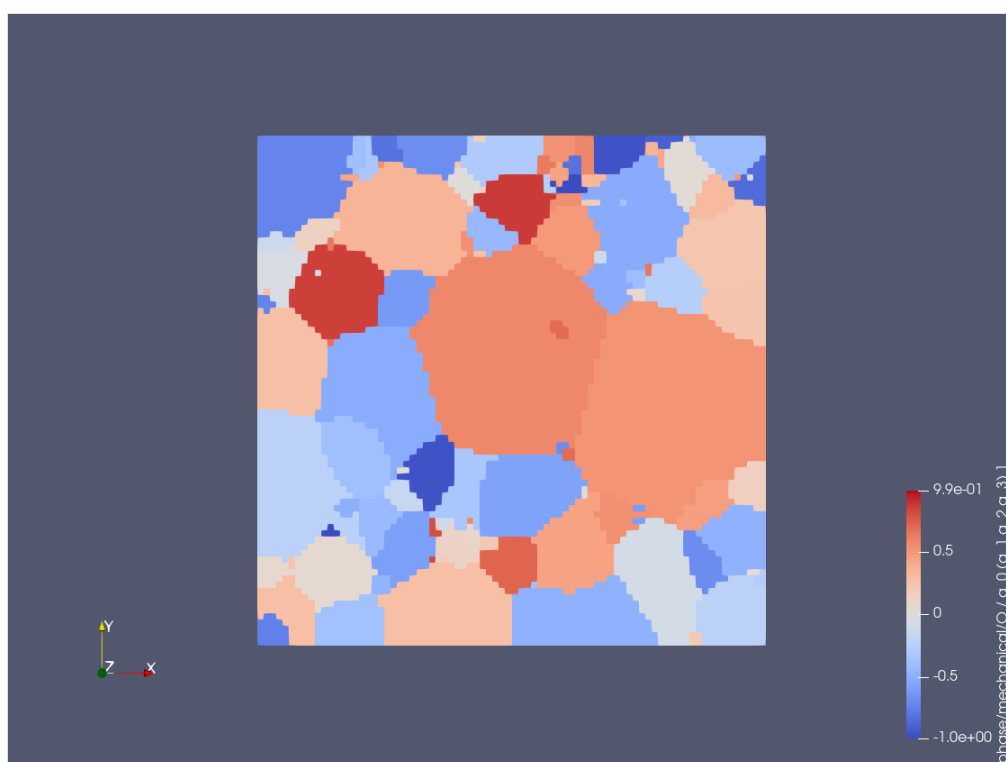
Εικόνα 60. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα x μετά την προσομοίωση δοκιμής



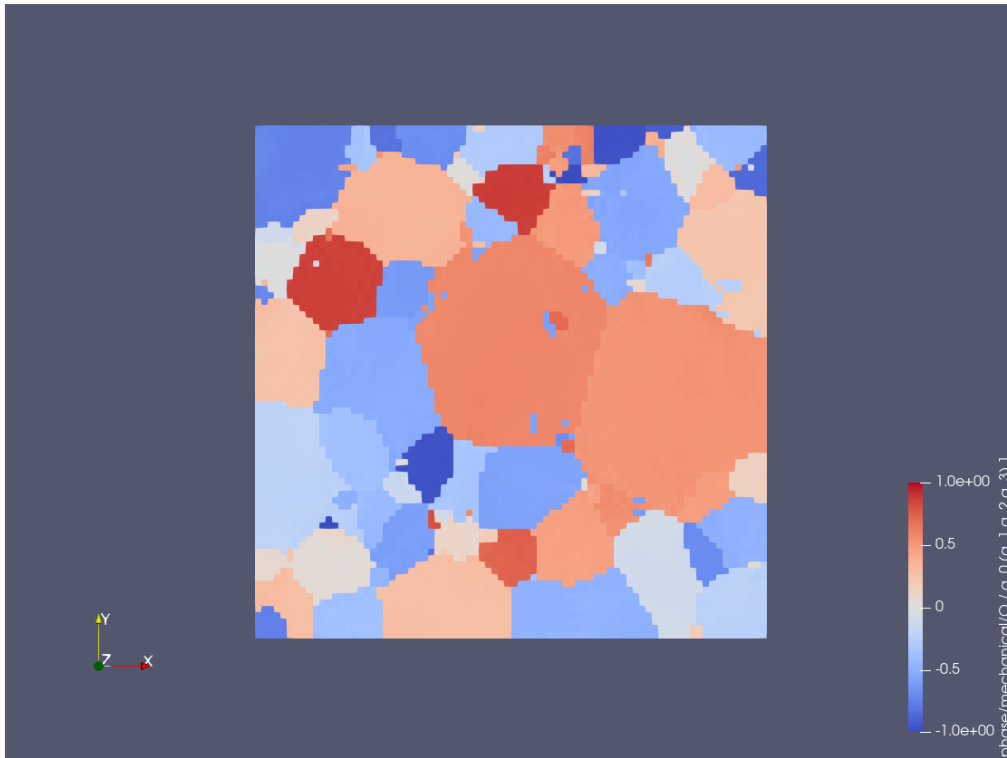
Εικόνα 61. Λεπτομέρεια (σε μεγέθυνση) της προηγούμενης εικόνας

Στα παραπάνω παρατηρείται ανάπτυξη μικρογωνιών εσωτερικά των κόκκων ως αποτέλεσμα της αναπτυσσόμενης τάσης. Συγκεκριμένα, τα χρώματα σκουραίνουν υποδεικνύοντας αύξηση της γωνίας και τάση σχηματισμού ιστού τύπου S και Bs στη διεύθυνση παράλληλη με τον άξονα εφελκυσμού, όπως επιβεβαιώνεται και από τη βιβλιογραφία [73].

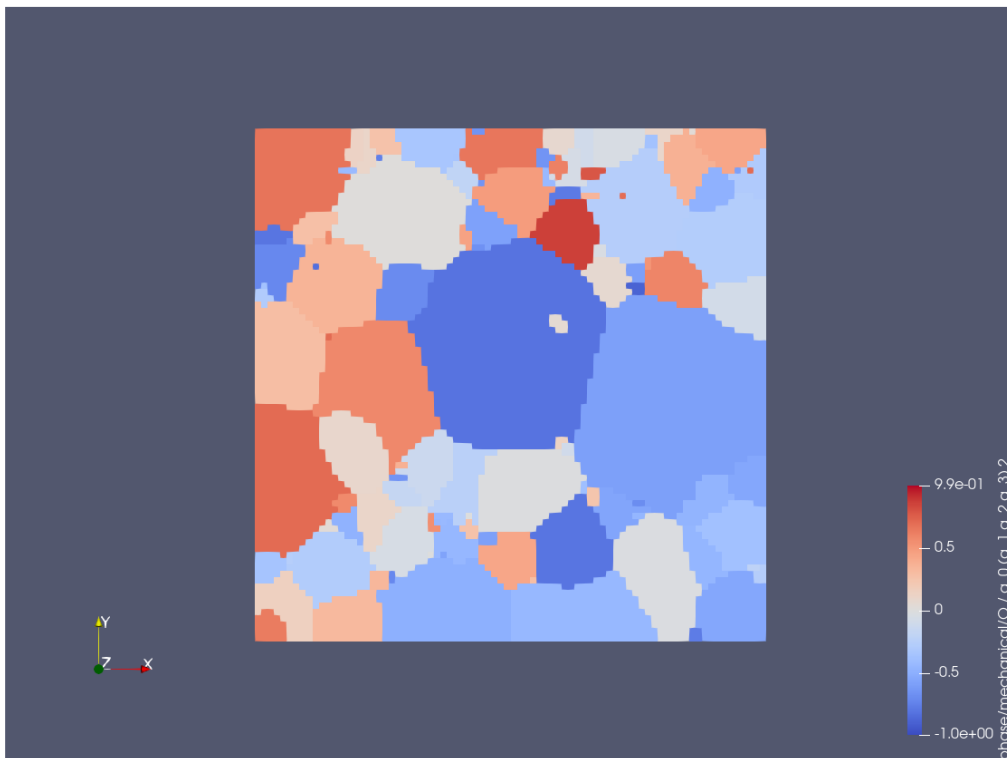
Αντιθέτως, στις εικόνες που ακολουθούν, όπου απεικονίζονται πάλι οι γωνίες, αλλά αναφορικά με τον άξονα  $y$  και  $z$ , δεν παρατηρείται τέτοιο φαινόμενο, καθώς αυτοί οι άξονες δε συμμετέχουν ενεργά στη δοκιμή. Παρατηρείται, ωστόσο, η δημιουργία υποκόκκων εσωτερικά των ευμεγεθών κόκκων αλουμινίου. Αποτελούν το αποτέλεσμα της ασκούμενης τάσης και του μηχανισμού των διαταραχών υπό ασκούμενο φορτίο που αναλύθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο και, η αύξηση του αριθμού των ορίων υποκόκκων μετά από εφελκυστική δοκιμή, επιβεβαιώνεται και στη βιβλιογραφία [73].



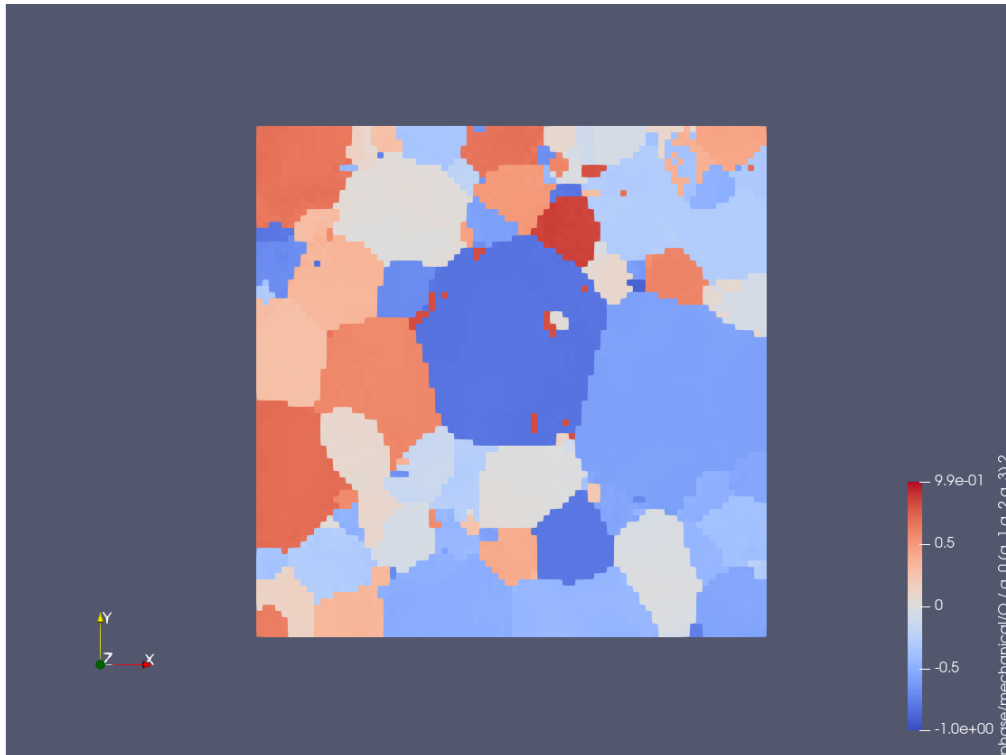
Εικόνα 62. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα  $y$  πριν τη προσομοίωση δοκιμής



Εικόνα 63. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα γ μετά τη προσομοίωση δοκιμής

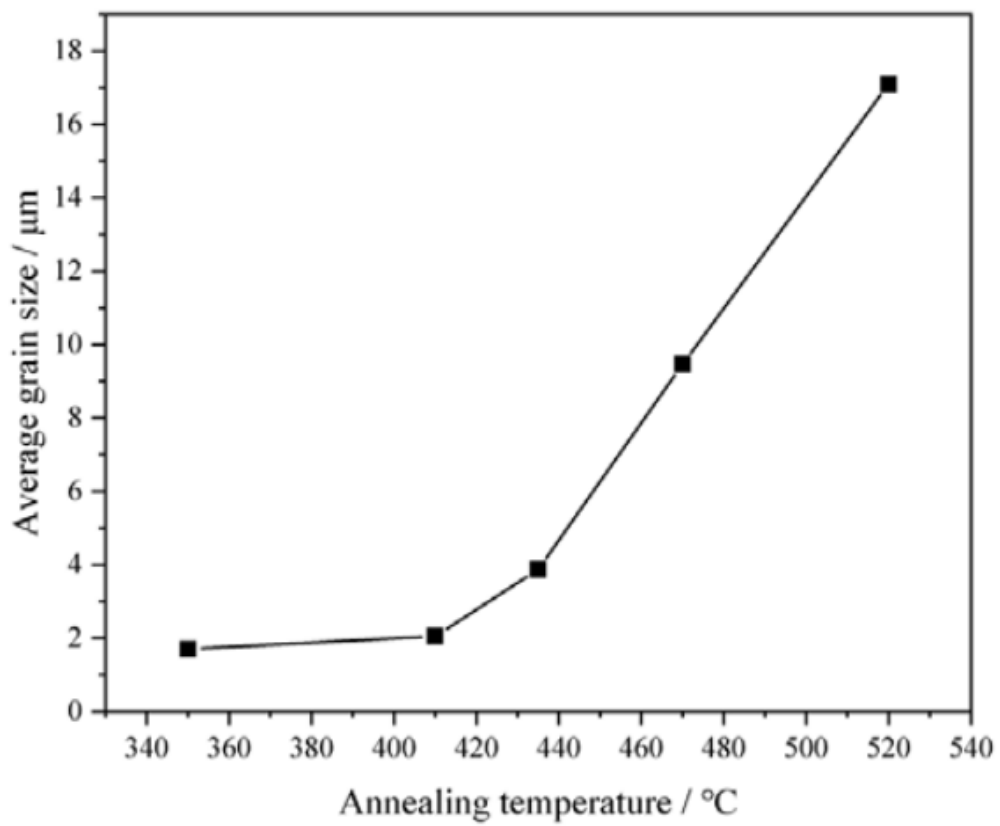


Εικόνα 64. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα z πριν τη προσομοίωση δοκιμής



Εικόνα 65. Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα z μετά τη προσομοίωση δοκιμής

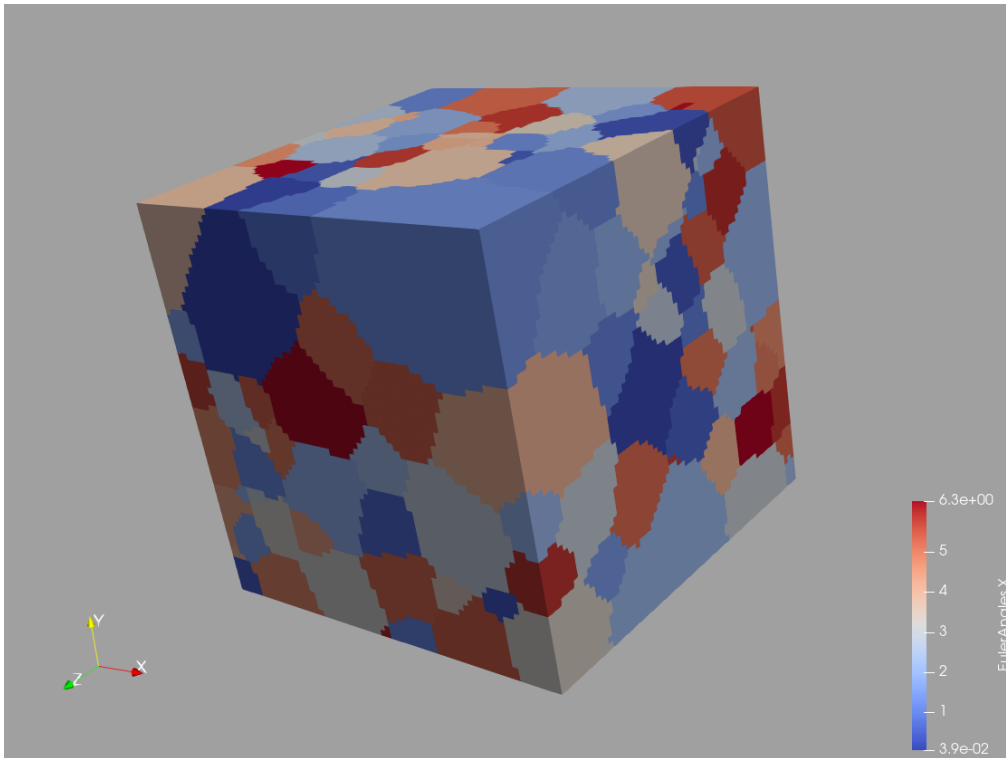
Δυστυχώς, η ποσοτική ανάλυση της παραπάνω μελέτης δεν μπόρεσε να διευρυνθεί, λόγω της δυσκολίας διενέργειας πειραματικών δοκιμών στην εποχή της πανδημίας και των περιορισμών που επήλθαν τους προηγούμενους μήνες. Συνεπώς, δεν κατέστη δυνατή με τις παρούσες συνθήκες η πλήρης πρόβλεψη των μηχανικών ιδιοτήτων διφασικών ή τριφασικών κραμάτων. Μία εναλλακτική λύση αποτέλεσε η ψηφιακή διενέργεια εργαστηριακών δοκιμών με FEA για την υποστήριξη της τελικής προσομοίωσης, αλλά αυτή η μέθοδος δεν έχει πιστοποιηθεί επαρκώς βιβλιογραφικά και ξεφεύγει λίγο από τον στόχο της παρούσας εργασίας. Γι' αυτό το λόγο, συντάχθηκε περιπτωσιολογική μελέτη για ψυχρά ελασμένο και ανακρυσταλλωμένο μονοφασικό εμπορικό αλουμίνιο παρομοίου μεγέθους κόκκων προκειμένου να επιβεβαιωθεί η αξιοπιστία της μεθόδου.



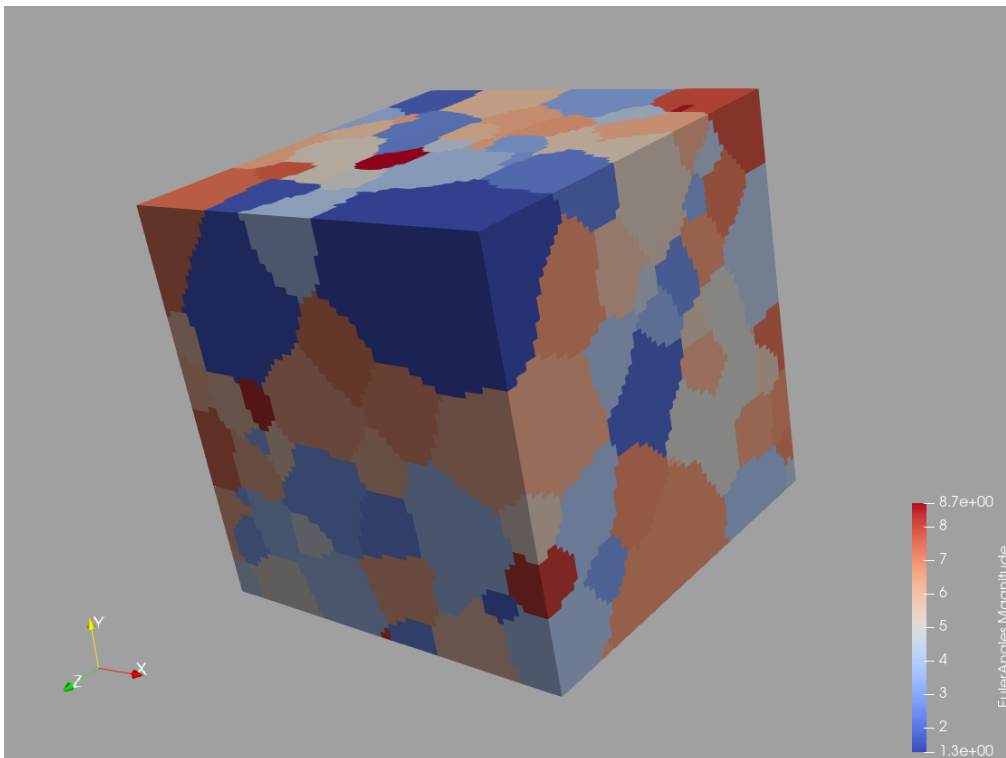
Εικόνα 66. Μέγεθος κόκκου ανοιτημένου και εμπορικά καθαρού αλουμινίου

Ακολουθούν, αντίστοιχα με την προηγούμενη ανάλυση, ποιοτικά και ποσοτικά αποτελέσματα.

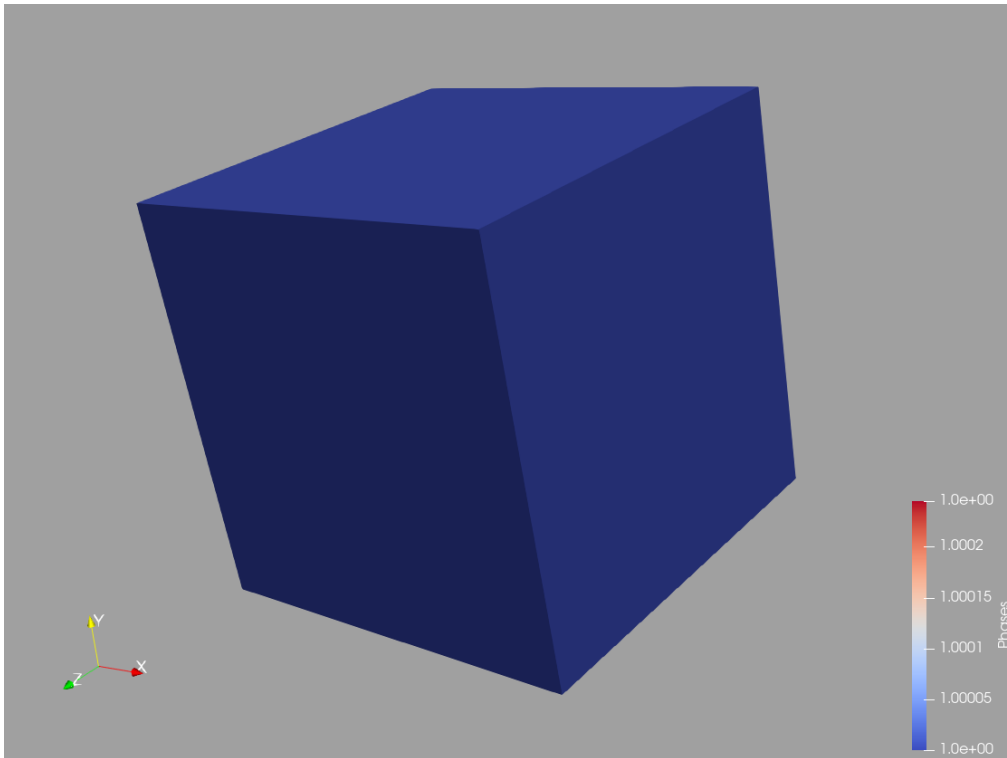




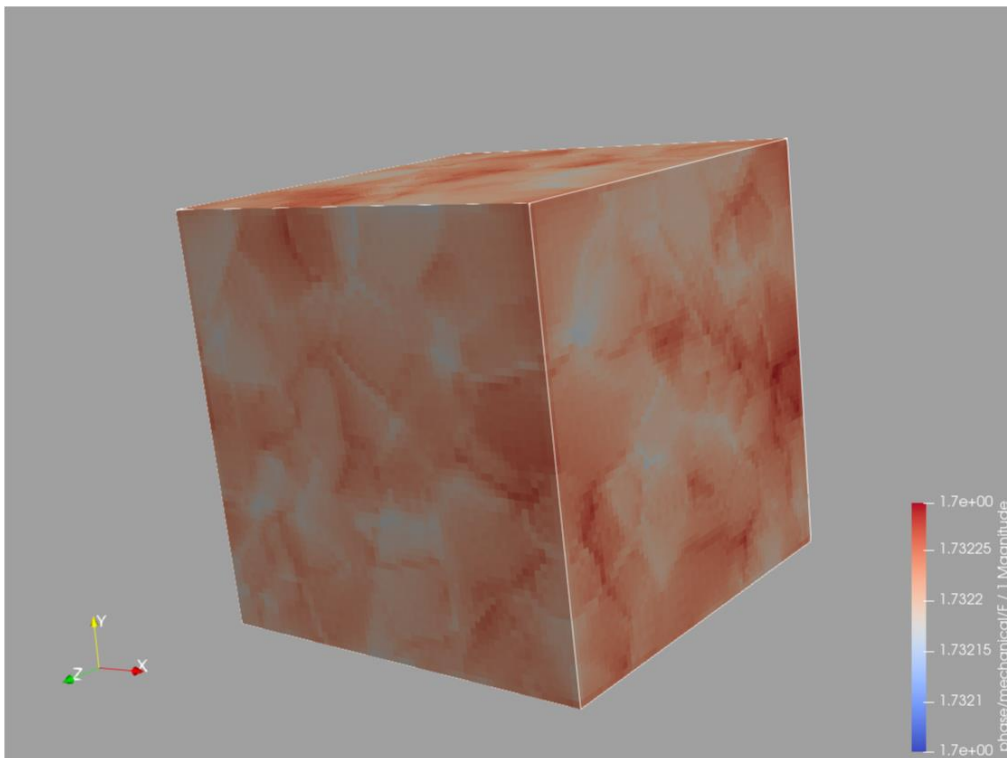
Εικόνα 67. Προσανατολισμός κόκκων αναφορικά με τον άξονα x



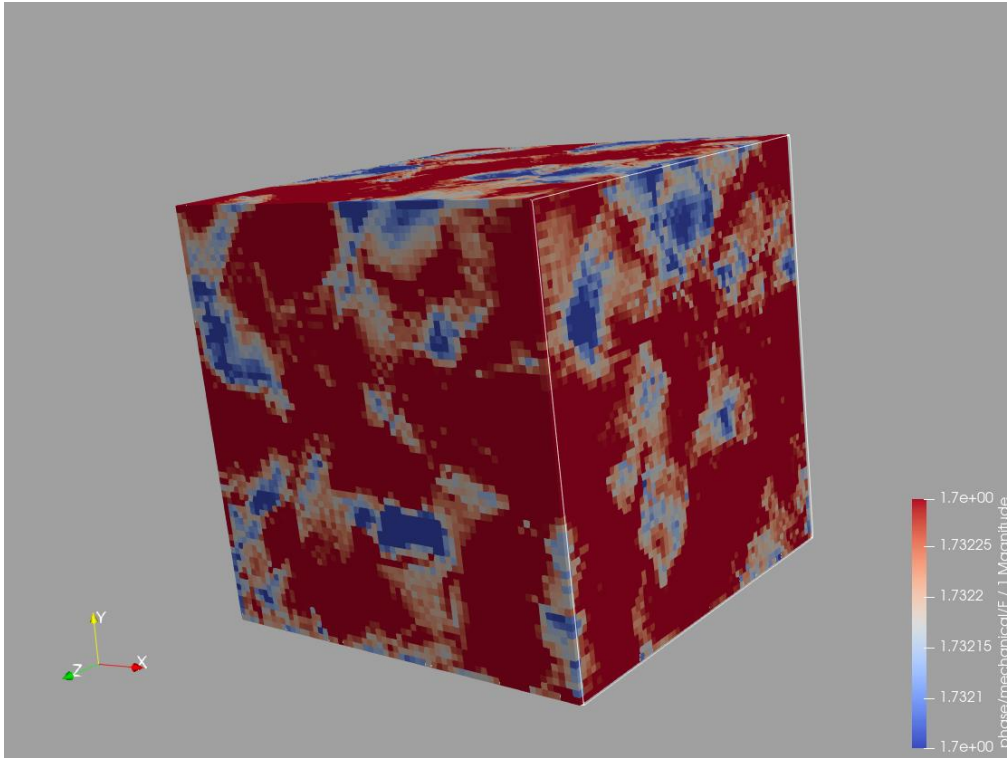
Εικόνα 68. Γενικός προσανατολισμός κόκκων



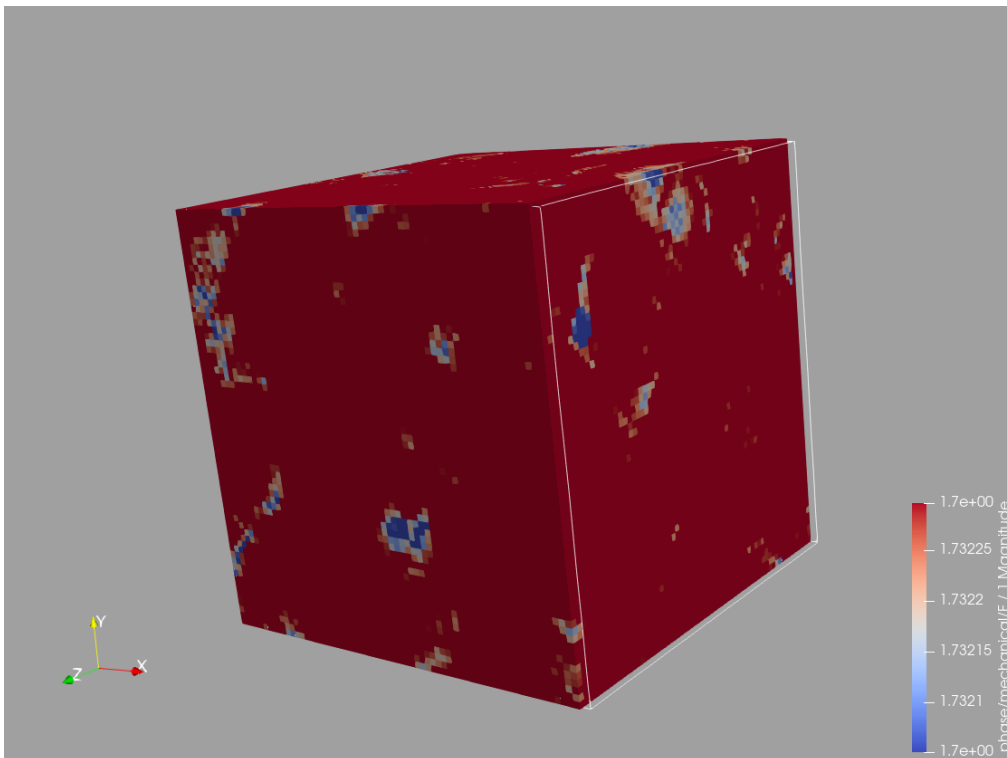
Εικόνα 69. Η μία φάση στον όγκο



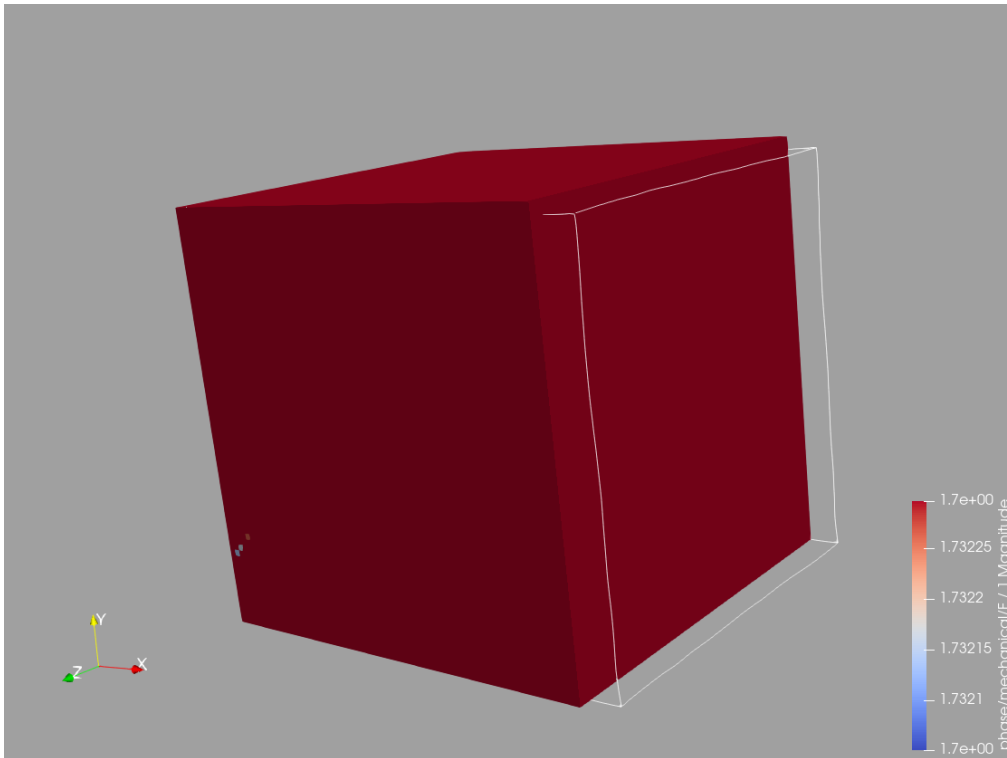
Εικόνα 70. Παραμόρφωση στο βήμα 4/100



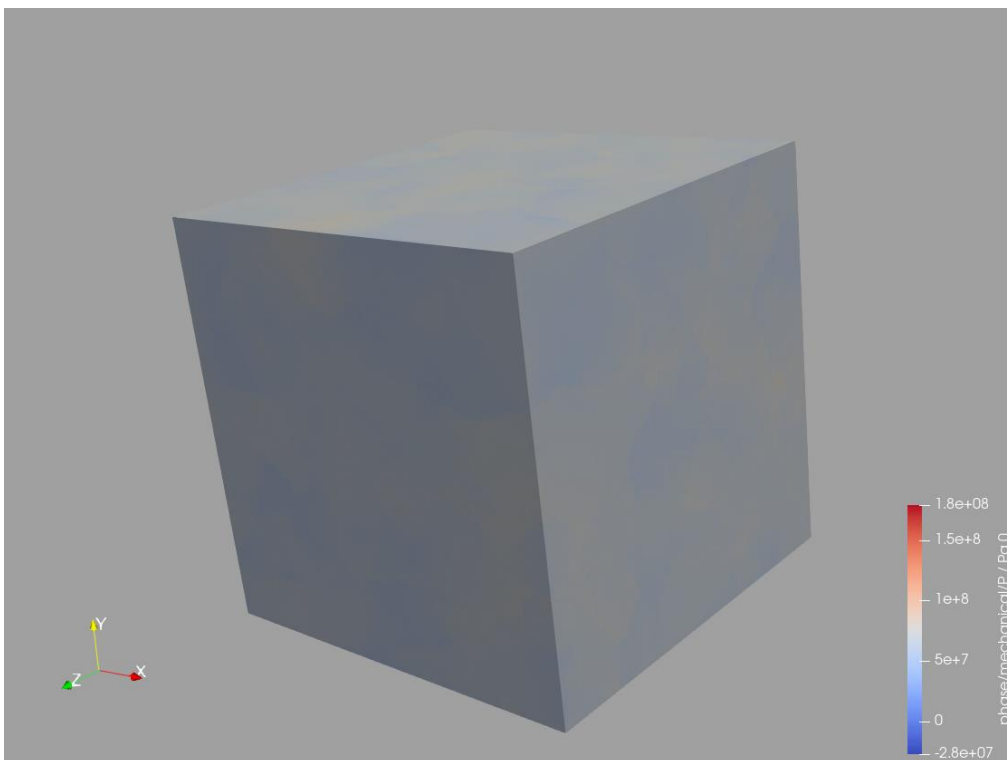
Εικόνα 71. Παραμόρφωση στο βήμα 24/100



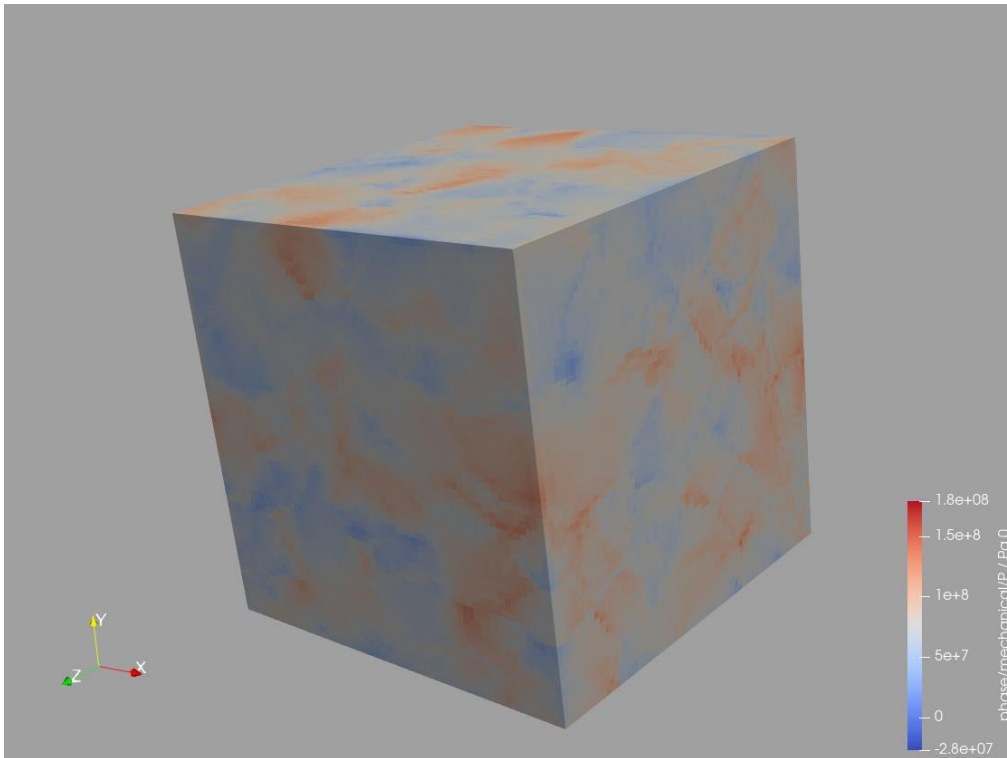
Εικόνα 72. Παραμόρφωση στο βήμα 48/100



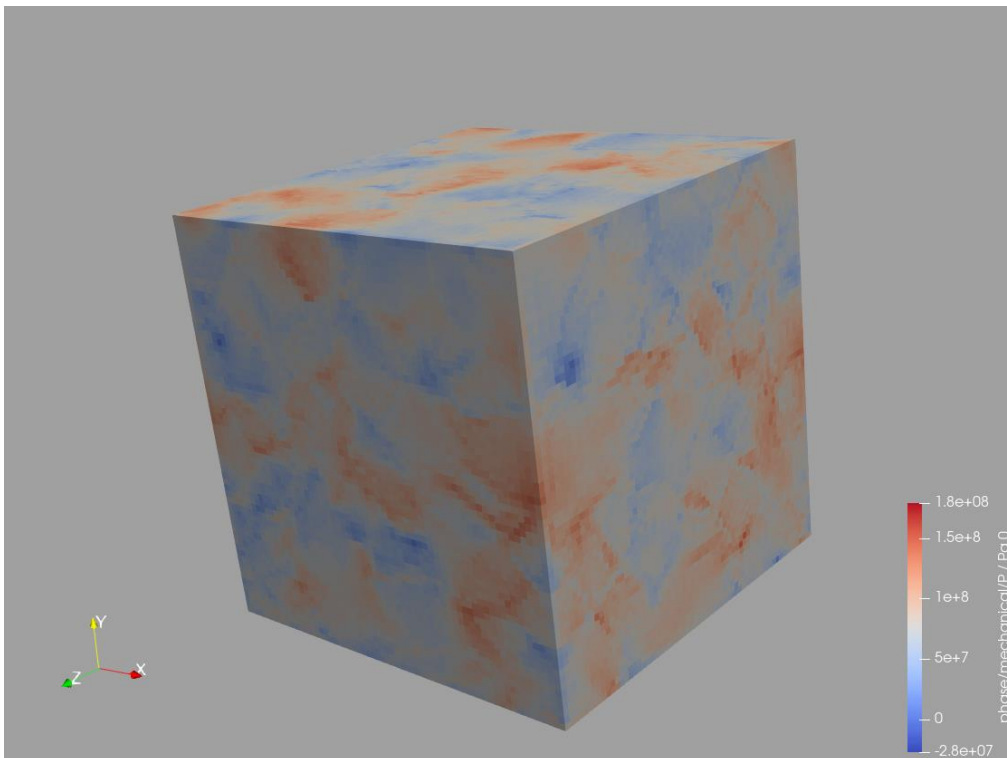
Εικόνα 73. Παραμόρφωση στο βήμα 100/100



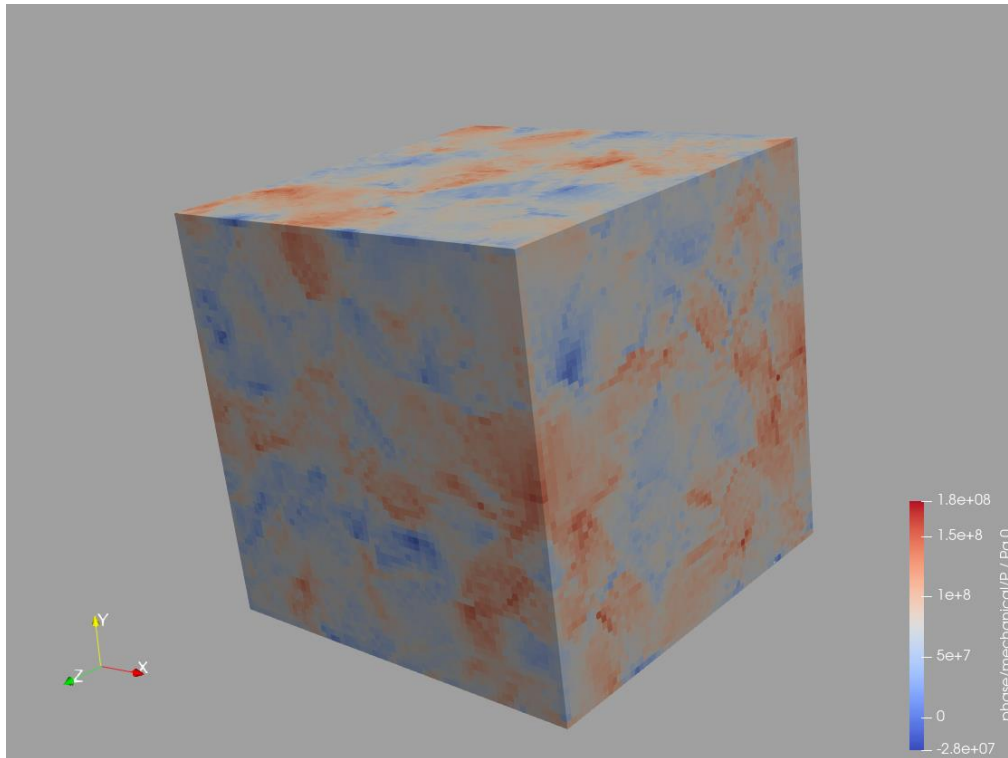
Εικόνα 74. Τάση στο βήμα 4/100



Εικόνα 75. Τάση στο βήμα 12/100

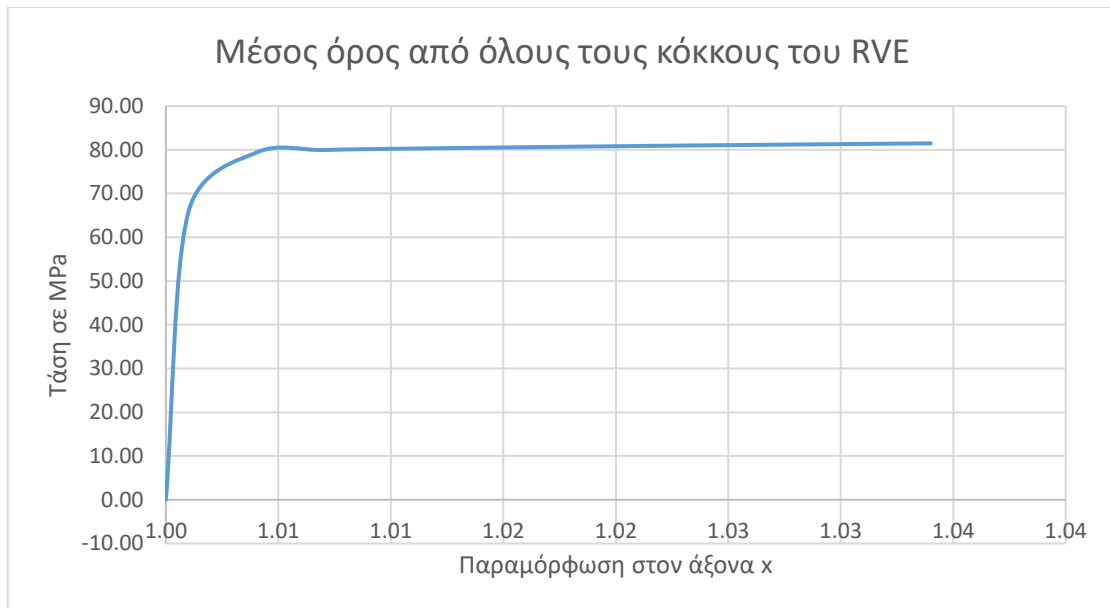


Εικόνα 76. Τάση στο βήμα 28/100

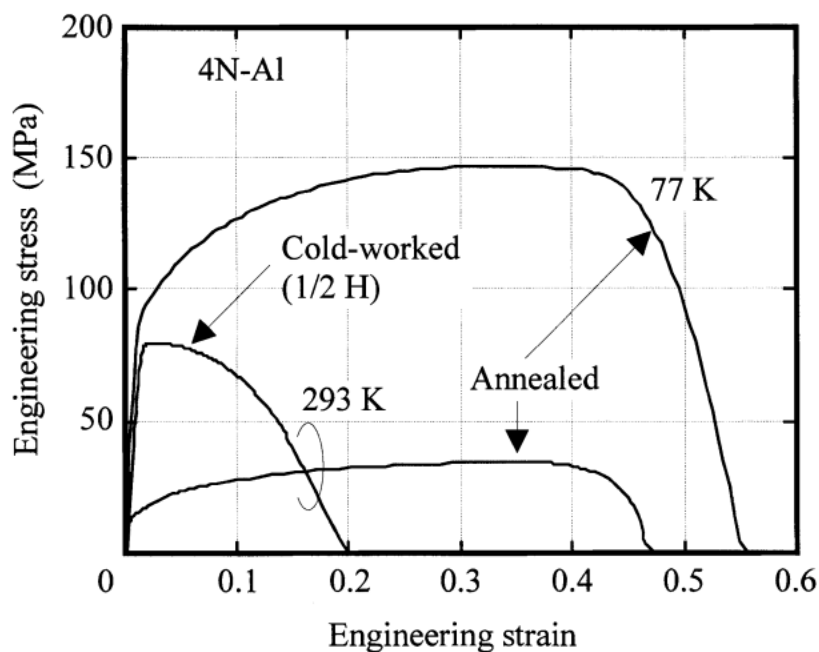


Εικόνα 77. Τάση στο βήμα 100/100

Τα παραπάνω αποτελέσματα αποτελούν την οπτικοποίηση του συνόλου των αριθμητικών αποτελεσμάτων, μέρος των οποίων παρατίθεται παρακάτω για τον άξονα του εφελκυσμού. Παρουσιάζεται δηλαδή η ποσοτική σύγκριση των δύο παραπάνω μεγεθών τάσης και παραμόρφωσης δημιουργώντας ένα διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης μέσω της προσομοίωσης. Το διάγραμμα αφορά, όπως και στο εξεταζόμενο κράμα, ένα πλήρως ανακρυσταλλωμένο δείγμα σε υψηλή θερμοκρασία ανόπτησης.



Σημειώνεται ότι στο DAMASK το σημείο έναρξης της παραμόρφωσης είναι το 1 και όχι το 0, καθώς ο όγκος σε αδιάστατο μέγεθος  $1.0 \times 1.0 \times 1.0$  θεωρείται ακέραιος. Παρατηρείται ότι το εύρος της τάσης και του ορίου διαρροής βρίσκεται εντός των ορίων, που παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία για βιομηχανικό αλουμίνιο 4N [74].



Εικόνα 78. Εύρος καμπυλών τάσης-παραμόρφωσης ανάλογα με τη θερμοκρασία και τον χρόνο ανόπτησης [74]

## 6 Συμπεράσματα

---

### 6.1 Συμπεράσματα μελέτης

Στην παραπάνω μελέτη παρουσιάστηκε μεθοδολογία για την προσομοίωση της μηχανικής δοκιμής του εφελκυσμού του κράματος αλουμινίου A5182-O με στόχο την πρόβλεψη της τελικής κρυσταλλικής δομής και παραμόρφωσης στον όγκο και ιστό. Είναι σαφές ότι η παραπάνω μελέτη λειτουργεί ως απόδειξη της ιδέας (proof of concept) του κλάδου της υπολογιστικής μηχανικής. Από την μελέτη η εξάγονται τα παρακάτω συμπεράσματα:

- 1) Η στατιστική αναπαράσταση του υλικού είναι δυνατή τόσο από βιβλιογραφικά δεδομένα όσο και από πειραματικά μέσω σαρώσεων EBSD για τον προσδιορισμό των προσανατολισμών των κόκκων και του κρυσταλλογραφικού ιστού. Σαρώσεις SEM – EBSD είναι επίσης απαραίτητες για τον προσδιορισμό των ποσοστών των φάσεων και του κρυσταλλογραφικού ιστού στο RVE αναφοράς.
- 2) Με τον ορισμό του RVE αναφοράς, προκύπτει η δυνατότητα άπειρης παραμετροποίησης αυτού μέσω της αλλαγής του προσανατολισμού, του μεγέθους και του σχήματος του κόκκου ή και μέσω της ενίσχυσης ή απόσβεσης του κρυσταλλογραφικού ιστού. Δίνεται, έτσι, η δυνατότητα προσομοίωσης μικροδομών από εναλλακτικές μηχανικές και χημικές κατεργασίες χωρίς την ανάγκη για επανάληψη της αρχικής διαδικασίας εξοικονομώντας χρόνο, κεφάλαιο και πόρους.
- 3) Η προσομοίωση των μηχανικών δοκιμών σε κρυσταλλικά υλικά ευνοείται από τη χρήση μοντέλων κρυσταλλικής πλαστικότητας, καθώς ο χρόνος της προσομοίωσης είναι μικρός και οι απαιτήσεις σε υπολογιστικούς πόρους είναι λιτές λόγω της χρήσης επιλυτών FFT έναντι FEM.
- 4) Παρατηρείται ένας αρχικός ιστός RCube στο δείγμα από τη σάρωση EBSD, ο οποίος επιτυχώς αναπαρίσταται στο sRVE και παρουσιάζει τάση μεταβολής προς ιστό S και B<sub>1</sub> στον άξονα του εφελκυσμού, ενώ παραμένει σταθερός στους υπόλοιπους άξονες.



- 5) Υπάρχει η δυνατότητα εξαγωγής αποτελεσμάτων σχετικά με τη μηχανική συμπεριφορά του εξεταζόμενου υλικού όπως φάνηκε στην περιπτωσιολογική μελέτη με προσομοίωση ελάχιστης μακροσκοπικής εφελκυστικής τάσης. Συγκεκριμένα, προέκυψε καμπύλη μηχανικής τάσης-παραμόρφωσης, που ταυτίζεται με το εύρος τιμών από αντίστοιχες πειραματικές καμπύλες εφελκυσμού.

## 6.2 Προτάσεις για περαιτέρω έρευνα

Η παρούσα εργασία εξετάζει ένα νέο κεφάλαιο του σχετικά νεοσύστατου κλάδου ICME. Η μεθοδολογία, που αναπτύχθηκε επιτρέπει μία πρώτη μελέτη των μεθόδων πρόβλεψης μηχανικών και κρυσταλλογραφικών ιδιοτήτων των υλικών. Ωστόσο, πρόκειται μόνο για την αρχή, καθώς απαιτούνται αρκετά βήματα προκειμένου η μέθοδος να ενσωματωθεί ευρέως σε παραγωγικές μονάδες. Μερικά από αυτά παρατίθενται παρακάτω υπό μορφή προτάσεων για περαιτέρω έρευνα.

- 1) Βελτίωση μεθοδολογίας ανάγνωσης δεδομένων από EBSD και SEM και, ορισμός προτύπου για την εξαγωγή απολύτως συμβατών αποτελεσμάτων με τα λογισμικά προσομοίωσης.
- 2) Επικύρωση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων μέσω εργαστηριακών αποτελεσμάτων και δοκιμών για την επιβεβαίωση της ακριβείας τους.
- 3) Αναζήτηση βέλτιστης γεωμετρίας RVE και sRVE με στόχο την ισορροπία μεταξύ αξιόπιστων αποτελεσμάτων και απαραίτητων υπολογιστικών πόρων ή χρόνου προσομοίωσης. Αντίστοιχη προσπάθεια έγινε από τους J.Lopez και J.Hidalgo (2020) [75].
- 4) Εξειδίκευση μεθοδολογίας σε κράματα βιομηχανικού ενδιαφέροντος όπως τα αλουμίνια της σειράς 3000 και 5000 με στόχο την ενίσχυση της ελληνικής βιομηχανίας και των εξαγωγικών της προϊόντων με στόχο τη βελτίωση της ανταγωνιστικότητας.
- 5) Ενσωμάτωση στη μεθοδολογία επιπλέον εμπορικών και ειδικών προγραμμάτων με στόχο την περαιτέρω αυτοματοποίηση της διαδικασίας εξαγωγής αξιόπιστων αποτελεσμάτων

## 7 Ευρετήριο

---

### 7.1 Κατάλογος εικόνων

**Εικόνα 1.** Διάγραμμα φάσεων Al-Mg [12]

**Εικόνα 2.** Διάγραμμα φάσεων συστήματος Al-Mg-Mn-Fe-Si για 0,3% Mn, 0,25% Fe και 0,14% Si [13]

**Εικόνα 3.** Μικροδομή ψυχρής έλασης AA5182 με υποβιβασμό 90% και ανόπτηση στους 589K για 3 ώρες [16]

**Εικόνα 4.** Φάσεις ανοπτημένου κράματος AA5182 [13]

**Εικόνα 5.** Μεταβολές στην μορφολογία της μικροδομής κατά τη διεργασία της έλασης [17]

**Εικόνα 6.** Βασικά συστατικά του ιστού έλασης συστήματος FCC σε τρισδιάστατο Euler χώρο [19]

**Εικόνα 7.** Πολικό διάγραμμα {111} AA5182 ψυχρής έλασης [19]

**Εικόνα 8.** Εξέλιξη ιστού κατά την ψυχρή έλαση AlMg1Mn1 [19]

**Εικόνα 9.** Ένταση β-ίνας ψυχρός ελασμένου AlMg1Mn1 για ανόπτηση σε  $T_{hr} = 260, 280$  και  $315^{\circ}\text{C}$  αντίστοιχα [19]

**Εικόνα 10.** Ανάπτυξη Cube σε ιστό β-ίνα [21]

**Εικόνα 11.** Απεικόνιση R και Cube ιστού [17]

**Εικόνα 12.** Πολικό διάγραμμα {111} όπου παρατηρείται ο έντονος κυβικός ιστός [17]

**Εικόνα 13.** Διαταραχές ακμής [23]

**Εικόνα 14.** Διαταραχές ορατές με TEM. Το βέλος a απεικονίζει γραμμή διαταραχής παράλληλη στην επιφάνεια του δείγματος ενώ το b απεικονίζει γραμμή διαταραχής λοξή προς το δείγμα [25]

**Εικόνα 15.** Διάνυσμα b σταθερό στο χώρο [24]

**Εικόνα 16.** Όρια υποκόκκων μικρής και μεγάλης γωνίας [30]

**Εικόνα 17.** Διαφορά μικροδομής ανάλογα με το χρόνο ανόπτησης (10, 20, 40, 60, 120, 240, 600, 1200 δευτερόλεπτα αντίστοιχα) σε κράμα Al-Mg-Si [29]

**Εικόνα 18.** Σε όγκο πλέγματος 8x8x8 με 512 κρυστάλλους διαφορετικού προσανατολισμού ο κάθε κρύσταλλος διαιρείται σε 8x8x8 υποκύβους ίδιου προσανατολισμού στοιχείων μέσα στο κάθε κρύσταλλο με τα κέντρα του

μετασχηματισμού Fourier στο κέντρο κάθε υποκύβου δημιουργώντας πλέγμα Fourier 64x64x64 [35]

**Εικόνα 19.** Σύγκριση πειραματικής/υπολογισμένης καμπύλης εφελκυσμού. Η πράσινη γραμμή, που αντιστοιχεί στον δεξί άξονα, παρουσιάζει το σφάλμα της μεθόδου [41]

**Εικόνα 20.** Συστήματα ολίσθησης οικογένειας {111} [42]

**Εικόνα 21.** Νόμος του Schmid για μονοκρύσταλλο [43]

**Εικόνα 22.** Μοντελοποίηση περιοχή θραύσης με τη μεταβλητή  $\phi$  [45]

**Εικόνα 23.** Material Point Model [34]

**Εικόνα 24.** Ανάλυση κλίσης διανύσματος παραμόρφωσης [37]

**Εικόνα 25.** Δομή MPM όπου παρατηρείται η αρχιτεκτονική του μοντέλου όπου το πρώτο επίπεδο αφορά τον μακρόκοσμο, το δεύτερο αφορά το σύνολο των κόκκων, το τρίτο αφορά τον κάθε κόκκο ξεχωριστά και το τέταρτο αφορά τη μικροδομή του εκάστοτε κόκκου [40]

**Εικόνα 26.** Αρχιτεκτονική προσδιορισμού ελαστικο-πλαστικής συμπεριφοράς [34]

**Εικόνα 27.** Μοντέλα ομογενοποίησης στο DAMASK [34]

**Εικόνα 28.** Βασικός κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός ως {111} πολικός χάρτης σε προσομοίωση 1000 κόκκων σε παραμόρφωση με τους αναγραφόμενους περιορισμούς [19]

**Εικόνα 29.** Αρχιτεκτονική αρχείου που θα χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία RVE [51]

**Εικόνα 30.** Αρχιτεκτονική αρχείου DREAM3D [53]

**Εικόνα 31.** Αρχιτεκτονική διάταξης για ερμηνεία δεδομένων EBSD και παραγωγή αρχείου .vti αρχείου στο λογισμικό DREAM3D [56]

**Εικόνα 32.** Τελικό RVE που προέκυψε από τη διάταξη του λογισμικού DREAM3D [56]

**Εικόνα 33.** Πολικός χάρτης {111} εξεταζόμενου δείγματος

**Εικόνα 34.** Πολικός χάρτης {111} εξεταζόμενου δείγματος

**Εικόνα 35.** Χωρική αναπαράσταση γωνιών Euler εξεταζόμενου δείγματος

**Εικόνα 36.** Αρχιτεκτονική φίλτρων για δημιουργία RVE [57]

**Εικόνα 37.** Κάναβος σε έλασμα AA5182-O

**Εικόνα 38.** Βιβλιογραφική κατανομή μεγέθους κόκκου αλουμινίου σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O [59]

**Εικόνα 39.** Κατανομή μεγέθους κόκκου αλουμινίου σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O από StatsGenerator

**Εικόνα 40.** Χάρτες ODF από StatsGenerator

**Εικόνα 41.** Μέγεθος φάσης Mg<sub>2</sub>Si [60]

**Εικόνα 42.** Κατανομή μεγέθους κόκκου Mg<sub>2</sub>Si σε ανακρυσταλλωμένο έλασμα AA5182-O από το StatsGenerator

**Εικόνα 43.** Προσανατολισμός κόκκων αναφορικά με τον άξονα x

**Εικόνα 44.** Γενικός προσανατολισμός κόκκων

**Εικόνα 45.** Οι δύο φάσεις στην επιφάνεια του όγκου

**Εικόνα 46.** Η φάση β στον συνολικό όγκο

**Εικόνα 47.** Παραμόρφωση στο βήμα 4/100

**Εικόνα 48.** Παραμόρφωση στο βήμα 24/100

**Εικόνα 49.** Παραμόρφωση στο βήμα 48/100

**Εικόνα 50.** Παραμόρφωση στο βήμα 100/100

**Εικόνα 51.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 4/100

**Εικόνα 52.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 8/100

**Εικόνα 53.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 12/100

**Εικόνα 54.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 16/100

**Εικόνα 55.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 28/100

**Εικόνα 56.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 60/100

**Εικόνα 57.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 80/100

**Εικόνα 58.** Τάση στον x άξονα στο βήμα 100/100

**Εικόνα 59.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα x πριν τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 60.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα x μετά τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 61.** Μεγέθυνσης της προηγούμενης εικόνας

**Εικόνα 62.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα y πριν τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 63.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα y μετά τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 64.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα z πριν τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 65.** Γωνίες κόκκων αναφορικά με τον άξονα z μετά τη προσομοίωση δοκιμής

**Εικόνα 66.** Μέγεθος κόκκου ανοπτημένου και εμπορικά καθαρού αλουμινίου

**Εικόνα 67.** Προσανατολισμός κόκκων αναφορικά με τον άξονα x

**Εικόνα 68.** Γενικός προσανατολισμός κόκκων

**Εικόνα 69.** Η μία φάση στον όγκο

**Εικόνα 70.** Παραμόρφωση στο στιγμή βήμα 4/100

**Εικόνα 71.** Παραμόρφωση στο βήμα 24/100

**Εικόνα 72.** Παραμόρφωση στο βήμα 48/100

**Εικόνα 73.** Παραμόρφωση στο βήμα 100/100

**Εικόνα 74.** Τάση στο βήμα 4/100

**Εικόνα 75.** Τάση στο βήμα 12/100

**Εικόνα 76.** Τάση στο βήμα 28/100

**Εικόνα 77.** Τάση στο βήμα 100/100

**Εικόνα 78.** Εύρος καμπυλών τάσης-παραμόρφωσης ανάλογα με τη θερμοκρασία και τον χρόνο ανόπτησης [74]

## 7.2 Κατάλογος πινάκων

**Πίνακας 1.** Σύνθεση κράματος 5182 με περιεκτικότητα στοιχείων % κατά βάρος [9]

**Πίνακας 2.** Μηχανικές ιδιότητες κράματος 5182 [9]

**Πίνακας 3.** Κρυσταλλογραφικά συστατικά αλουμινίου έλασης [17], [19]

**Πίνακας 4.** Κρυσταλλογραφικά συστατικά αλουμινίου έλασης [17], [19]

**Πίνακας 5.** Ελαστικές σταθερές αλουμινίου και Πυριτικού Μαγνησίου

**Πίνακας 6.** Χαρακτηριστικά και παράμετροι υπολογιστικού περιβάλλοντος

**Πίνακας 7.** Υπολογιστικοί χρόνοι σε λεπτά και δευτερόλεπτα

## 7.3 Κατάλογος εξισώσεων

**Εξίσωση 1.** Ταχύτητα μετακίνησης διαταραχών [26]

**Εξίσωση 2.** Ρυθμός μεταβολής διαταραχών [26]

**Εξίσωση 3.** Μέτρο ελαστικότητας σε AA5182 [30]

**Εξίσωση 4.** Όριο διαρροής [32]

**Εξίσωση 5.** Εξίσωση διατμητικής τάσης [43]

**Εξίσωση 6.** Εξίσωση μέσης τιμής  $\xi^{\alpha}$  [36]

**Εξίσωση 7.** Εξίσωση μέσης τιμής  $\gamma^{\alpha}$  [36]

**Εξίσωση 8.** Εξίσωση Orowan για ρυθμό διάτμησης  $\gamma_{\alpha}$  [37]

**Εξίσωση 9.** Υπολογισμούς μέτρου διάτμησης G [37]

**Εξίσωση 10.** Υπολογισμός αντίστασης ολίσθησης  $\hat{\tau}^{\alpha}$  [37]

**Εξίσωση 11.** Εξίσωση για υπολογισμό ταχύτητας διαταραχών [37]

**Εξίσωση 12.** Ρυθμός μεταβολής  $\phi$  Ginzburg-landau [37]

**Εξίσωση 13.** Εξίσωση 1ου Piola-Kirchhoff τανυστή τάσης [46]

**Εξίσωση 14.** Δεύτερης Piola-Kirchhoff τάση  $S$  [37]

**Εξίσωση 15.** Κλίση του διανύσματος ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης  $LP$  [37]

**Εξίσωση 16.** Γενικευμένος νόμος του Hooke [38]

---

## 8 Βιβλιογραφία

---

- [1] 'What is aluminium'.  
[https://www.aluminiumleader.com/about\\_aluminium/what\\_is\\_aluminum/](https://www.aluminiumleader.com/about_aluminium/what_is_aluminum/) (ημερομηνία πρόσβασης 17 Ιούλιος 2021).
- [2] 'Aluminium Properties, Production and Applications: an Introduction', *AZoM.com*, 17 Μάιος 2005. <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=2861> (ημερομηνία πρόσβασης 18 Ιούλιος 2021).
- [3] 'aluminum | Uses, Properties, & Compounds', *Encyclopedia Britannica*.  
<https://www.britannica.com/science/aluminum> (ημερομηνία πρόσβασης 18 Ιούλιος 2021).
- [4] P. N. H. Nakashima, 'The Crystallography of Aluminum and Its Alloys', στο *Encyclopedia of Aluminum and Its Alloys*, 1η έκδ., Boca Raton: CRC Press, 2019. doi: 10.1201/9781351045636-140000245.
- [5] J. R. Davis, Επιμ., 'Aluminum and Aluminum Alloys', στο *Alloying: understanding the basics*, Materials Park, OH: ASM International, 2001, σσ. 351–416. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο:  
<https://materialsdata.nist.gov/bitstream/handle/11115/173/Aluminum%20and%20Aluminum%20Alloys%20Davis.pdf>
- [6] 'The Aluminium Automotive Manual'. European Aluminium Association, 2002. Ημερομηνία πρόσβασης: 9 Φεβρουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: <https://www.european-aluminium.eu/media/1533/aam-materials-3-designation-system.pdf>
- [7] Γ. ΧΡΥΣΟΥΛΑΚΗΣ και Ι. Δ. ΠΑΝΤΕΛΗΣ, 'Κράματα Αλουμινίου', στο *ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΤΩΝ ΜΕΤΑΛΛΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ*, Αθήνα: Παπασωτηρίου, 2008, σσ. 561–574.
- [8] 'Understanding The Alloys Of Aluminum'.  
<http://www.alcotec.com/us/en/education/knowledge/techknowledge/understanding-the-alloys-of-aluminum.cfm> (ημερομηνία πρόσβασης 19 Ιούλιος 2021).
- [9] '5182 (AlMg4.5Mn0.4, A95182) Aluminum :: MakeItFrom.com'.  
<https://www.makeitfrom.com/material-properties/5182-ALMg4.5Mn0.4-A95182-Aluminum> (ημερομηνία πρόσβασης 6 Ιανουάριος 2022).
- [10] 'Effects of alloying elements on properties of aluminum alloys [SubsTech]'.  
[https://www.substech.com/dokuwiki/doku.php?id=effects\\_of\\_alloying\\_elements\\_on\\_properties\\_of\\_aluminum\\_alloys](https://www.substech.com/dokuwiki/doku.php?id=effects_of_alloying_elements_on_properties_of_aluminum_alloys) (ημερομηνία πρόσβασης 6 Ιανουάριος 2022).
- [11] 'Aluminum Alloys – Effects of Alloying Elements'.  
<http://www.totalmateria.com/Article55.htm> (ημερομηνία πρόσβασης 6 Ιανουάριος 2022).
- [12] M. Mezbahul-Islam, A. O. Mostafa, και M. Medraj, 'Essential Magnesium Alloys Binary Phase Diagrams and Their Thermochemical Data', *J. Mater.*, τ. 2014, σσ. 1–33, Απριλίου 2014, doi: 10.1155/2014/704283.
- [13] O. Engler, K. Kuhnke, και J. Hasenclever, 'Development of intermetallic particles during solidification and homogenization of two AA 5xxx series Al-Mg alloys with different Mg contents', *J. Alloys Compd.*, τ. 728, σσ. 669–681, Δεκεμβρίου 2017, doi: 10.1016/j.jallcom.2017.09.060.

- [14] G. Yi, K. C. Littrell, J. D. Poplawsky, D. A. Cullen, E. Sundberg, και M. L. Free, 'Characterization of the effects of different tempers and aging temperatures on the precipitation behavior of Al-Mg (5.25 at.%) - Mn alloys', *Mater. Des.*, τ. 118, σσ. 22–35, Μαρτίου 2017, doi: 10.1016/j.matdes.2017.01.021.
- [15] A. Zielinska-Lipiec, B. Dubiel, και A. Czyska-Filemonowicz, 'Microstructure of the complex metallic  $\beta$ -Al<sub>3</sub>Mg<sub>2</sub> phase', *Inzynieria Mater.*, τχ. 175, σσ. 562–564, 2010.
- [16] W. Wen και J. G. Morris, 'The effect of cold rolling and annealing on the serrated yielding phenomenon of AA5182 aluminum alloy', *Mater. Sci. Eng. A*, τ. 373, τχ. 1–2, σσ. 204–216, Μαΐου 2004, doi: 10.1016/j.msea.2004.01.041.
- [17] O. Engler και J. Hirsch, 'Control of recrystallisation texture and texture-related properties in industrial production of aluminium sheet', *Int. J. Mater. Res.*, τ. 100, τχ. 4, σσ. 564–575, Απριλίου 2009, doi: 10.3139/146.110063.
- [18] *Crystallographic texture of materials*. New York: Springer, 2014.
- [19] J. Hirsch, 'Texture evolution during rolling of aluminium alloys', *TMS Light Met.*, σσ. 1071–1077, Ιανουαρίου 2008.
- [20] W. J. Poole, M. Militzer, και M. A. Wells, 'Modelling recovery and recrystallisation during annealing of AA 5754 aluminium alloy', *Mater. Sci. Technol.*, τ. 19, τχ. 10, σσ. 1361–1368, Οκτωβρίου 2003, doi: 10.1179/026708303225005980.
- [21] O. Daaland και E. Nes, 'Recrystallization Texture Development in Commercial Al-Mn-Mg Alloys', *Acta Mater*, τ. 44, τχ. 4, σσ. 1413–1435, Ιουλίου 1996.
- [22] 'What is a Dislocation? - Definition from Corrosionpedia', *Corrosionpedia*. <http://www.corrosionpedia.com/definition/402/dislocation> (ημερομηνία πρόσβασης 16 Ιανουάριος 2022).
- [23] H. Tummala, '3D Discrete Dislocation Dynamics simulations of the role of interfaces in confined materials - : application to electronic devices such as LEDs', 2016.
- [24] S. Chris, 'Crystal shear stress and yielding; Burgers' vector; introduction to edge, screw, and mixed dislocations; stress, strain, and stored energy', MIT, 21 Σεπτεμβρίου 2009. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: [https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-40j-physical-metallurgy-fall-2009/lecture-notes/MIT3\\_40JF09\\_lec03.pdf](https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-40j-physical-metallurgy-fall-2009/lecture-notes/MIT3_40JF09_lec03.pdf)
- [25] 'Keywords 'dislocation' | Keywords | Glossary of TEM Terms | JEOL'. [https://www.jeol.co.jp/en/words/emterms/search\\_result.html?keyword=dislocation](https://www.jeol.co.jp/en/words/emterms/search_result.html?keyword=dislocation) (ημερομηνία πρόσβασης 16 Ιανουάριος 2022).
- [26] J. A. Saeter, B. Forbord, H. E. Vatne, και E. Nes, 'Modelling recovery and recrystallization, applied to back-annealing of aluminium sheets alloys', *Allum. Alloys*, τ. 1, σσ. 113–126.
- [27] R. Ivanov, 'Solute clustering in multi-component aluminium alloys', Université Grenoble Alpes. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01688296/document>
- [28] M. R. Drury και G. M. Pennock, 'Subgrain Rotation Recrystallization in Minerals', *Mater. Sci. Forum*, τ. 550, σσ. 95–104, Ιουλίου 2007, doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.550.95.



- [29] E. M. Taleff, K. Takata, και K. Ichitani, 'Hot and Warm Deformation of AA5182 Sheet Materials: Ductility and Microstructure Evolution', στο *Proceedings of the 12th International Conference on 1231 Aluminium Alloys*, Yokohama, Japan, Σεπτεμβρίου 2010, σσ. 1231–1236.
- [30] A. Yamamoto, M. Tsukamoto, και D. Okai, 'Changes in Microstructures during Annealing after Cold-Rolling at 30% and 50% Reduction on Al-Mg-Si Alloy', *Mater. Trans.*, τ. 52, τχ. 5, σσ. 876–881, 2011, doi: 10.2320/matertrans.L-MZ201122.
- [31] G. Falkinger και P. Simon, 'Static recovery of an AlMg4.5Mn aluminium alloy during multi-pass hot-rolling', *Procedia Eng.*, τ. 207, σσ. 31–36, 2017, doi: 10.1016/j.proeng.2017.10.733.
- [32] H. Mecking και U. F. Kocks, 'Kinetics of flow and strain-hardening', *Acta Metall.*, τ. 29, τχ. 11, σσ. 1865–1875, Νοεμβρίου 1981, doi: 10.1016/0001-6160(81)90112-7.
- [33] P. Ferretti, G. M. Santi, C. Leon-Cardenas, E. Fusari, G. Donnici, και L. Frizziero, 'Representative Volume Element (RVE) Analysis for Mechanical Characterization of Fused Deposition Modeled Components', *Polymers*, τ. 13, τχ. 20, σ. 3555, Οκτωβρίου 2021, doi: 10.3390/polym13203555.
- [34] F. Roters, P. Eisenlohr, C. Kords, D. D. Tjahjanto, M. Diehl, και D. Raabe, 'DAMASK: the Düsseldorf Advanced MATERIAL Simulation Kit for studying crystal plasticity using an FE based or a spectral numerical solver', *Procedia IUTAM*, τ. 3, σσ. 3–10, 2012, doi: 10.1016/j.piutam.2012.03.001.
- [35] R. A. Lebensohn, 'N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform', *Acta Mater.*, τ. 49, τχ. 14, σσ. 2723–2737, Αυγούστου 2001, doi: 10.1016/S1359-6454(01)00172-0.
- [36] M. Diehl, M. Wicke, P. Shanthraj, F. Roters, A. Brueckner-Foit, και D. Raabe, 'Coupled Crystal Plasticity–Phase Field Fracture Simulation Study on Damage Evolution Around a Void: Pore Shape Versus Crystallographic Orientation', *JOM*, τ. 69, τχ. 5, σσ. 872–878, Μαΐου 2017, doi: 10.1007/s11837-017-2308-8.
- [37] D. Wang, 'Damage and Strain Patterning Simulation of Structural Heterogeneity', Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Fuxin, China, 2019.
- [38] F. Roters κ.ά., 'DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale', *Comput. Mater. Sci.*, τ. 158, σσ. 420–478, Φεβρουαρίου 2019, doi: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030.
- [39] M. Umar, F. Qayyum, M. U. Farooq, L. A. Khan, S. Guk, και U. Prah, 'Investigating the Effect of Cementite Particle Size and Distribution on Local Stress and Strain Evolution in Spheroidized Medium Carbon Steels using Crystal Plasticity-Based Numerical Simulations', *Steel Res. Int.*, τ. 92, τχ. 3, σ. 2000407, Μαρτίου 2021, doi: 10.1002/srin.202000407.
- [40] 'DAMASK Home'. <https://damask.mpie.de/index.html> (ημερομηνία πρόσβασης 10 Ιανουάριος 2022).
- [41] Y. Qian, Q. Fan, X. Liu, D. Wang, και Y. Zhou, 'Crystal Plasticity Finite Element Method for Slip Systems Evolution Analysis of  $\alpha/\beta$  Duplex Titanium Alloys during Quasi-Static Tensile Testing', *Appl. Sci.*, τ. 10, τχ. 21, σ. 7782, Νοεμβρίου 2020, doi: 10.3390/app10217782.
- [42] 'Face-Centered Cubic (cF) — DAMASK'. [https://damask.mpie.de/documentation/crystal\\_structures/face-centered-cubic.html](https://damask.mpie.de/documentation/crystal_structures/face-centered-cubic.html) (ημερομηνία πρόσβασης 9 Ιανουάριος 2022).

- [43] ‘Slip geometry: the critical resolved shear stress’.  
[https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip\\_geometry.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/slip/slip_geometry.php) (ημερομηνία πρόσβασης 9 Ιανουάριος 2022).
- [44] A. S. Tetelman, ‘Dislocation dipole formation in deformed crystals’, *Acta Metall.*, τ. 10, τχ. 9, σσ. 813–820, Σεπτεμβρίου 1962, doi: 10.1016/0001-6160(62)90095-0.
- [45] C. Miehe, F. Aldakheel, και A. Raina, ‘Phase field modeling of ductile fracture at finite strains: A variational gradient-extended plasticity-damage theory’, *Int. J. Plast.*, τ. 84, σσ. 1–32, Σεπτεμβρίου 2016, doi: 10.1016/j.ijplas.2016.04.011.
- [46] ‘Samer Adeen » First and Second Piola-Kirchhoff Stress Tensors’.  
<https://sameradeeb.srv.ualberta.ca/stress/first-and-second-piola-kirchhoff-stress-tensors/> (ημερομηνία πρόσβασης 10 Ιανουάριος 2022).
- [47] S. Li και E. Sitnikova, *Representative volume elements and unit cells: concepts, theory, applications and implementation*. Duxford, United Kingdom ; Cambridge, MA: Elsevier/Woodhead Publishing, 2020.
- [48] ‘Yield Surface Simulation, crystal plasticity, sheet forming, DAMASK, simulation, virtual laboratory, anisotropy, texture, polycrystal, micromechanics’.  
<https://www.dierk-raabe.com/yield-surface-simulation/> (ημερομηνία πρόσβασης 14 Ιανουάριος 2022).
- [49] H. MOUSSADDY, ‘A New Definition of The Representative Volume Element in Numerical Homogenization Problems and Its Application to The Performance Evaluation of Analytical Homogenization Models’. DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE - ECOLE POLYTECHNIQUE DE MONTREAL, Μάρτιος 2013. Ημερομηνία πρόσβασης: 11 Ιανουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο:  
[https://publications.polymtl.ca/1091/1/2013\\_HadiMoussaddy.pdf](https://publications.polymtl.ca/1091/1/2013_HadiMoussaddy.pdf)
- [50] D. Jeulin, T. Kanit, και S. Forest, ‘Representative Volume Element: A Statistical Point of View’, στο *Continuum Models and Discrete Systems*, D. J. Bergman και E. Inan, Επιμ. Dordrecht: Springer Netherlands, 2004, σσ. 21–27. doi: 10.1007/978-1-4020-2316-3\_5.
- [51] M. A. Groeber και M. A. Jackson, ‘DREAM.3D: A Digital Representation Environment for the Analysis of Microstructure in 3D’, *Integrating Mater. Manuf. Innov.*, τ. 3, τχ. 1, σσ. 56–72, Δεκεμβρίου 2014, doi: 10.1186/2193-9772-3-5.
- [52] *About DREAM.3D*. BlueQuartz Software, 2022. Ημερομηνία πρόσβασης: 20 Ιανουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο:  
<https://github.com/BlueQuartzSoftware/DREAM3D>
- [53] ‘DREAM.3D Data Structure # - DREAM.3D’.  
[http://www.dream3d.io/1\\_UsingDREAM3D/%5BA%5D\\_DataStructure/](http://www.dream3d.io/1_UsingDREAM3D/%5BA%5D_DataStructure/) (ημερομηνία πρόσβασης 20 Ιανουάριος 2022).
- [54] D. Brands, D. Balzani, L. Scheunemann, J. Schröder, H. Richter, και D. Raabe, ‘Computational modeling of dual-phase steels based on representative three-dimensional microstructures obtained from EBSD data’, *Arch. Appl. Mech.*, τ. 86, τχ. 3, σσ. 575–598, Μαρτίου 2016, doi: 10.1007/s00419-015-1044-1.
- [55] ‘DAMASK Documentation’.  
[https://damask.mpie.de/documentation/processing\\_tools/pre-processing.html](https://damask.mpie.de/documentation/processing_tools/pre-processing.html) (ημερομηνία πρόσβασης 20 Ιανουάριος 2022).

- [56] BlueQuartz Software, *Basic EBSD Data Analysis*, (2020). Ημερομηνία πρόσβασης: 20 Ιανουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: <https://www.youtube.com/watch?v=j7WtJOck1VI>
- [57] BlueQuartz Software, *Synthetic Tutorial Final*, (2017). Ημερομηνία πρόσβασης: 26 Ιανουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: <https://www.youtube.com/watch?v=qFomwKOWJ9Q>
- [58] 'StatsGenerator # - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/SyntheticBuildingFilters/StatsGeneratorFilter/#example-pipelines> (ημερομηνία πρόσβασης 22 Ιανουάριος 2022).
- [59] G. Li και S. Cui, 'Grain modeling and finite element simulation of damage evolution for AA5182-O aluminum alloy sheet', *J. Mater. Res. Technol.*, τ. 9, τχ. 5, σσ. 10559–10575, Σεπτεμβρίου 2020, doi: 10.1016/j.jmrt.2020.07.089.
- [60] Α. Κοντοπούλου, 'Εξέλιξη της μικροδομής και του κρυσταλλογραφικού ιστού από την χύτευση έως την έλαση κράματος αλουμινίου', Διπλωματική Εργασία, ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΜΕΤΑΛΛΕΙΩΝ –ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ, Αθήνα, 2019.
- [61] 'InitializeSyntheticVolume - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/SyntheticBuildingFilters/InitializeSyntheticVolume/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [62] 'EstablishShapeTypes - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/SyntheticBuildingFilters/EstablishShapeTypes/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [63] 'Pack Primary Phases # - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/SyntheticBuildingFilters/PackPrimaryPhases/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [64] 'FindSurfaceFeatures - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/GenericFilters/FindSurfaceFeatures/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [65] 'FindNeighbors - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/StatisticsFilters/FindNeighbors/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [66] 'MatchCrystallography - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/SyntheticBuildingFilters/MatchCrystallography/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [67] 'GenerateIPFCOLORS - DREAM.3D'. <http://www.dream3d.io/Filters/OrientationAnalysisFilters/GenerateIPFCOLORS/> (ημερομηνία πρόσβασης 26 Ιανουάριος 2022).
- [68] J. C. Tucker, A. R. Cerrone, A. R. Ingraffea, και A. D. Rollett, 'Crystal plasticity finite element analysis for René88DT statistical volume element generation', *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, τ. 23, τχ. 3, σ. 035003, Απριλίου 2015, doi: 10.1088/0965-0393/23/3/035003.
- [69] T. Fiedler, 'Numerical and Experimental Investigation of Hollow Sphere Structures in Sandwich Panels', Universidade de Aveiro - Departamento de Engenharia Mecânica, Portugal, 2007. Ημερομηνία πρόσβασης: 27 Ιανουάριος 2022. [Έκδοση σε ψηφιακή μορφή]. Διαθέσιμο στο: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03101656/document>

- [70] J. Vallin, M. Mongy, K. Salama, και O. Beckman, 'Elastic Constants of Aluminum', *J. Appl. Phys.*, τ. 35, τχ. 6, σσ. 1825–1826, Ιουνίου 1964, doi: 10.1063/1.1713749.
- [71] O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004. doi: 10.1007/978-3-642-18865-7.
- [72] 'Generate a Three-Step Load Case for the Grid Solver — DAMASK'. [https://damask.mpie.de/documentation/examples/loadcase\\_generation.html](https://damask.mpie.de/documentation/examples/loadcase_generation.html) (ημερομηνία πρόσβασης 28 Ιανουάριος 2022).
- [73] S. Papadopoulou, V. Loukadakis, Z. Zacharopoulos, και S. Papaefthymiou, 'Influence of Uniaxial Deformation on Texture Evolution and Anisotropy of 3104 Al Sheet with Different Initial Microstructure', *Metals*, τ. 11, τχ. 11, σ. 1729, Οκτωβρίου 2021, doi: 10.3390/met11111729.
- [74] O. Umezawa και K. Nagai, 'Microstructural refinement of an As-cast Al-12.6 wt pct Si alloy by repeated thermomechanical treatment to produce a heavily deformable material', *Metall. Mater. Trans. A*, τ. 30, τχ. 8, σσ. 2221–2228, Αυγούστου 1999, doi: 10.1007/s11661-999-0034-8.
- [75] J. Galán-López και J. Hidalgo, 'Use of the Correlation between Grain Size and Crystallographic Orientation in Crystal Plasticity Simulations: Application to AISI 420 Stainless Steel', *Crystals*, τ. 10, τχ. 9, σ. 819, Σεπτεμβρίου 2020, doi: 10.3390/cryst10090819.