



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΕΤΑΛΛΕΙΟΛΟΓΩΝ – ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

## Επίδραση των Διαφορών Προσανατολισμού στις Προσομοιώσεις Μικροδομής

*(Implementation and Characterization of the Influence  
of Misorientations in Microstructure-based  
Simulations)*

Διπλωματική Εργασία  
Γεωργίου Νικήτας-Βασίλειος

Επιβλέπων: Αν. Καθ. Dr.-Ing. Σπύρος Α. Παπαευθυμίου

ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΛΙΟΣ 2023









ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΕΤΑΛΛΕΙΟΛΟΓΩΝ – ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ  
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

## Επίδραση των Διαφορών Προσανατολισμού στις Προσομοιώσεις Μικροδομής

*(Implementation and Characterization of the Influence  
of Misorientations in Microstructure-based  
Simulations)*

Διπλωματική Εργασία

Γεωργίου Νικήτας-Βασίλειος

Εγκρίθηκε από την τριμελή επιτροπή στις 19/7/23

Γ. Φούρλαρης, Καθηγητής .....(Υπογραφή)

Α. Ξενίδης, Καθηγητής .....(Υπογραφή)

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

Επιβλέπων: Αν. Καθ. Dr.Ing. Σπύρος Α. Παπαευθυμίου

ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΛΙΟΣ 2023



Copyright © Γεωργίου Νικήτας-Βασίλειος

Με επιφύλαξη κάθε δικαιώματος. All rights reserved





*Στην μητέρα μου,*



*Εκπαίδευση δεν είναι  
το γέμισμα ενός κουβά,  
η γραφή σε άγραφο χαρτί  
και τ' άναμμα μιας φλόγας.*

*Αλίμονο, αν τα παιδιά  
ήταν άδειοι κουβάδες,  
άγραφα χαρτιά  
και δεν είχαν τη φλόγα μέσα τους.*

*Εκπαίδευση είναι  
το φιλτράρισμα του νερού στον κουβά,  
ώστε να γίνει  
κατάλληλο για πόση.*

*Εκπαίδευση είναι  
η επιμέλεια των γραπτών στο χαρτί,  
ώστε να γίνουν  
ποιοτικό βιβλίο.*

*Εκπαίδευση είναι  
ο αέρας που φουντώνει τη φλόγα της περιέργειας,  
ώστε να γίνει πυρκαγιά μάθησης.*

**Αποστόλης Ζυμβραγάκης, "Εκπαίδευση"**



## Ευχαριστίες

**Η** παρούσα Διπλωματική Εργασία, εκπονήθηκε σε συνεργασία μεταξύ της ερευνητικής ομάδας του Αν. Καθ. Dr. -Ing Σπ. Παπαευθυμίου της Σχολής Μεταλλειολόγων-Μεταλλουργών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, και της ερευνητικής ομάδας Micromechanics του Τμήματος Integrity and Structures, του Ινστιτούτου Χάλυβα (IEHK) του RWTH Aachen. Ευχαριστώ θερμά όλους όσους ενεπλάκησαν για την ομαλή έκβαση της έρευνας.

Ευχαριστώ θερμά τον Αν. Καθ. Dr.-Ing. Σπύρο Α. Παπαευθυμίου, επιβλέποντα της Διπλωματικής Εργασίας, για την εμπιστοσύνη και την εξαιρετική ευκαιρία που μου προσέφερε να εκπονήσω την έρευνα αυτή σε ένα καταξιωμένο Πολυτεχνείο του εξωτερικού. Τον ευχαριστώ ιδιαίτερα για την στενή καθοδήγηση καθ'όλη τη διάρκεια εκπόνησης της Εργασίας.

Επίσης, ευχαριστήσω τον Prof. Dr. -Ing. Sebastian Münstermann, για την υποδοχή και τον καθημερινό συντονισμό της Διπλωματικής Εργασίας μέσω της ερευνητικής του ομάδας, αλλά και για το ευρύτερο ενδιαφέρον του, κατά το διάστημα παραμονής μου ως επισκέπτη φοιτητή.

Θέλω να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στους Υποψηφίους Διδάκτορες (-Υ.Δ.) M.Sc. Maximilian Neite και τον Διπλ. Μηχανικό Βασίλη Λουκαδάκη, για την υποστήριξη, την συζήτηση των κατευθυντήριων οδηγιών των Καθηγητών, την επίλυση αποριών και την για την υποστήριξη τους στην οργάνωση της έρευνας.

Θερμές ευχαριστίες απευθύνω στον Καθ. Άνθιμο Ξενίδη, μέλος της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής για την υποστήριξη της έρευνας μέσω της χρήσης υπολογιστικού εξοπλισμού, που αποδείχθηκε καθοριστικός για την λήψη αξιόπιστων αποτελεσμάτων. Τον ευχαριστώ και για τον χρόνο, που διέθεσε για να μελετήσει την εργασία μου. Ευχαριστώ τον Καθ. Γ. Φούρλαρη, μέλος της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής, για τον χρόνο του στην μελέτη του κειμένου της εργασίας αυτής.

Ευχαριστώ τον Υ.Δ. Δοπλ. Μηχανικό Κωνσταντίνο Μπέτση, μέλος ερευνητικής ομάδας του κ. Ξενίδη, για όλη του την υποστήριξη.

Ευχαριστώ όλα τα μέλη του Ινστιτούτου Χάλυβα (IEHK) του RWTH Aachen, και κυρίως τους Υ.Δ. M.Sc. Manuel Henrich και M.Sc. Niklas Feldmann για την υποδοχή και την φιλοξενία στους χώρους του Ινστιτούτου. Έκαναν την παραμονή μου πιο εύκολη και ευχάριστη.

Τέλος, ιδιαίτερα ευχαριστώ την οικογένεια μου και τους φίλους μου, για την υπομονή και την στήριξη τους σε δύσκολες στιγμές, η συμβολή των οποίων ήταν καίρια για την επιτυχή ολοκλήρωση των σπουδών μου.



## Περίληψη

Ο σχεδιασμός νέων υλικών και η βελτίωση των ιδιοτήτων των υπαρχόντων περνάει πλέον μέσα από υπολογιστικές τεχνικές και μεθόδους, οι οποίες λαμβάνουν υπ' όψιν και τις κρίσιμες παραμέτρους της μικροδομής. Με απώτερο σκοπό αυτές οι μέθοδοι να γίνουν πιο αποτελεσματικές, αποδοτικές, και να αποκτήσουν ικανοποιητική συμφωνία με πειραματικές μετρήσεις, επιδιώκεται συνεχής βελτίωση της προσομοίωσης των φαινομένων, που πραγματοποιούνται κατά την εξεταζόμενη διεργασία. Υπό αυτό το πρίσμα εφαρμόζεται η μέθοδος πολλαπλών επιπέδων, η οποία χρησιμοποιεί ένα μικροσκοπικό γεωμετρικό μοντέλο προσομοίωσης της μικροδομής, συνήθως ένα Στατιστικό Στοιχείο Αντιπροσωπευτικού Όγκου (sRVE), και ένα μακροσκοπικό, το οποίο περιέχει τα μαθηματικά εργαλεία υπολογισμού των ιδιοτήτων των υλικών στην πλαστική περιοχή παραμόρφωσης (Crystal Plasticity Simulations). Αντικείμενο της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας αποτέλεσε η βελτίωση του λογισμικού δημιουργίας Στατιστικών Στοιχείων Αντιπροσωπευτικού Όγκου «DRAGen», ώστε αυτό να λαμβάνει υπ' όψιν παραμέτρους Διαφοράς Προσανατολισμών (misorientation parameters), των πειραματικών δεδομένων. Χωρίς καμία παρέμβαση, οι παράμετροι Διαφοράς Προσανατολισμού του sRVE, ακολουθούν αυτές του Mackenzie. Δύο μεθοδολογίες αναπτύχθηκαν. Η πρώτη (Μέθοδος 1), χρησιμοποίησε την μονοδιάστατη βελτιστοποίηση της Κατανομής Γωνιών Διαφορών Προσανατολισμού, ενώ η δεύτερη (Μέθοδος 2), αξιοποίησε την τρισδιάστατη βελτιστοποίηση της Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού, εκφρασμένη σε διανύσματα Rodriguez-Frank, διακρίτοντας έναν υπο-χώρο του χώρου RF. Η αποτελεσματικότητα των μεθόδων εξετάστηκε ως προς την συνάφεια των παραγόμενων κατανομών παραμέτρων Διαφορών Προσανατολισμού και Προσανατολισμού (ODF) με πειραματικές κατανομές δύο υλικών, ενός ηλεκτρικού και ενός φερριτικού χάλυβα. Η Μέθοδος 1 ήταν επιτυχής στην βελτιστοποίηση της Συνάρτησης Κατανομής Γωνιών Προσανατολισμού, ωστόσο, δεν υπήρξε διαφορά στην Συνάρτηση Κατανομής Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού. Αντίθετα, η Μέθοδος 2 με επιτυχία βελτιστοποίησε την Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού, κάτι που απεδείχθη μέσω διαγραμμάτων κατανομής γωνιών και αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού, όσο και με διαγράμματα τμημάτων τρισδιάστατων χώρων αναπαράστασης. Και οι δύο μέθοδοι διατήρησαν την ODF σε παραπλήσια επίπεδα σε σχέση με εκείνη πριν την έναρξη της βελτιστοποίησης. Ενώ, συμπεραίνεται ότι η Μέθοδος 2 είναι η κατάλληλη, υπάρχει μια σειρά από περιορισμούς που πρέπει να διευθετηθούν μελλοντικώς.





## **Abstract**

**M**odern material development is mostly based on simulative analyses of the microstructure. In order for those material simulations to be an efficient supplement to elaborate experimental investigations, constant further development of the phenomena depicted in the simulation model is necessary. For a realistic prediction of the material behavior, necessary are a geometry model of the microstructure on the one hand and a material model on the other hand. Often, statistically Representative Volume Elements (sRVE) of the microstructure are used in combination with a Crystal Plasticity (CP) model. Topic of this Diploma Thesis was the development of a feature for the RVE-Generator DRAGen, which would take experimental misorientation parameters distributions under consideration, during the sRVE generation. By default, without any optimization taking place, sRVE's Angle and Axis of Misorientation Distributions follow the respective of Mackenzie. Two methods were developed. Method 1 utilized a one-dimension Angle of Misorientation Distribution Monte Carlo optimization algorithm. Method 2 was based on the same principle, with the difference being the three-dimension optimization of the MDF, utilizing a RF space subvolume. The efficiency of the developed methods was examined by comparing RVE-generated ODFs and MDFs with the experimental data from two steel grades (electrical and ferritic). Method 1 was successful in optimizing the Angle of Misorientation Distribution, keeping the ODF steady, but the Axis of Misorientation remained unchanged. Method 2 was not only successful keeping the ODF steady, as its predecessor, but also the whole MDF for both steel grades. Although, Method 2 was concluded to be the most appropriate, it exhibits some limitations that must be overcome in the future.



## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>1. Στόχος</b> .....	3
<b>2. Θεωρητικό Μέρος</b> .....	6
2.1 Προσανατολισμός.....	6
2.1.1 Εισαγωγή.....	6
2.1.2 Πίνακες Περιστροφής ή Προσανατολισμού.....	8
2.1.3 Γωνία και Άξονας Περιστροφής.....	9
2.1.4 Χώρος Euler .....	10
2.1.5 Χώρος Rodriguez-Frank.....	14
2.1.6 Κυλινδρικός Χώρος Γωνία/Άξονα .....	16
2.1.7 Τετραδόνια .....	18
2.2 Όριο κόκκου .....	19
2.2.1 Εισαγωγικές έννοιες .....	19
2.2.2 Διαφορά Προσανατολισμού (Misorientation).....	19
2.2.2.1 Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού (Misorientation Distribution Function, MDF).....	20
2.2.2.2 Αναπαράσταση Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού.....	22
2.2.2.3 Πλέγμα Ταυτόσημων Θέσεων (Coincidence Site Lattice) .....	25
2.2.3 Επίπεδο Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Plane).....	28
2.3 Ηλεκτρικοί Χάλυβες.....	30
<b>3. Υπολογιστικό Μέρος</b> .....	33
3.1 Λογισμικό DRAGen.....	33
3.2 Βελτιστοποίηση Δεδομένων Διαφοράς Προσανατολισμού στο Λογισμικό DRAGen	35
3.2.1 Μέθοδος 1: Βελτιστοποίηση Κατανομής Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού	37
3.2.2 Μέθοδος 2: Βελτιστοποίηση Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού .....	39
<b>4. Αποτελέσματα και Συζήτηση</b> .....	43
4.1 Αποτελέσματα Μεθόδου 1 στον Ηλεκτρικό Χάλυβα .....	43
4.2 Αποτελέσματα Μεθόδου 1 στον Φερριτικό Χάλυβα .....	45

4.3	Αποτελέσματα Μεθόδου 2 στον Ηλεκτρικό Χάλυβα .....	48
4.4	Αποτελέσματα Μεθόδου 2 στον Φερριτικό Χάλυβα .....	51
4.5	Επίδραση των Μεθόδων στην ODF του Στοιχείου Αντιπροσωπευτικού Όγκου. ...	54
<b>5.</b>	<b>Συμπεράσματα.....</b>	<b>58</b>
<b>6.</b>	<b>Μελλοντική Έρευνα.....</b>	<b>60</b>
<b>7.</b>	<b>Αναφορές.....</b>	<b>61</b>
<b>8.</b>	<b>Παράρτημα .....</b>	<b>66</b>
8.1	Πίνακες Πράξεων Συμμετρίας Κυβικού Συστήματος (Cubic Crystal System Symmetry Operations Matrices).....	66
8.2	Πλέγματα Ταυτόσημων Θέσεων (Coincidence Site Lattices, CSLs).....	67
8.3	Ευρετήριο Εικόνων .....	69
8.4	Ευρετήριο Εξισώσεων.....	71
8.5	Ευρετήριο Πινάκων.....	72
8.6	Ευρετήριο Διαγραμμάτων .....	73
8.7	Ευρετήριο Σχημάτων.....	74

## 1. Στόχος

**Μ**ε την όλο και αυξανόμενη χρήση των υπολογιστικών εργαλείων, η στροφή των ερευνητών έχει στραφεί, τόσο στην βελτίωση των υπάρχοντων εργαλείων, όσο και στην ανάπτυξη νέων.

Συγκεκριμένα, στην Μεταλλουργία και Τεχνολογία των Υλικών, κάτω από την σκεπή του I.C.M.E (Integrated Computational Materials Engineering), έχουν αναπτυχθεί σειρά μεθοδολογιών για την πρόβλεψη ιδιοτήτων, όπως:

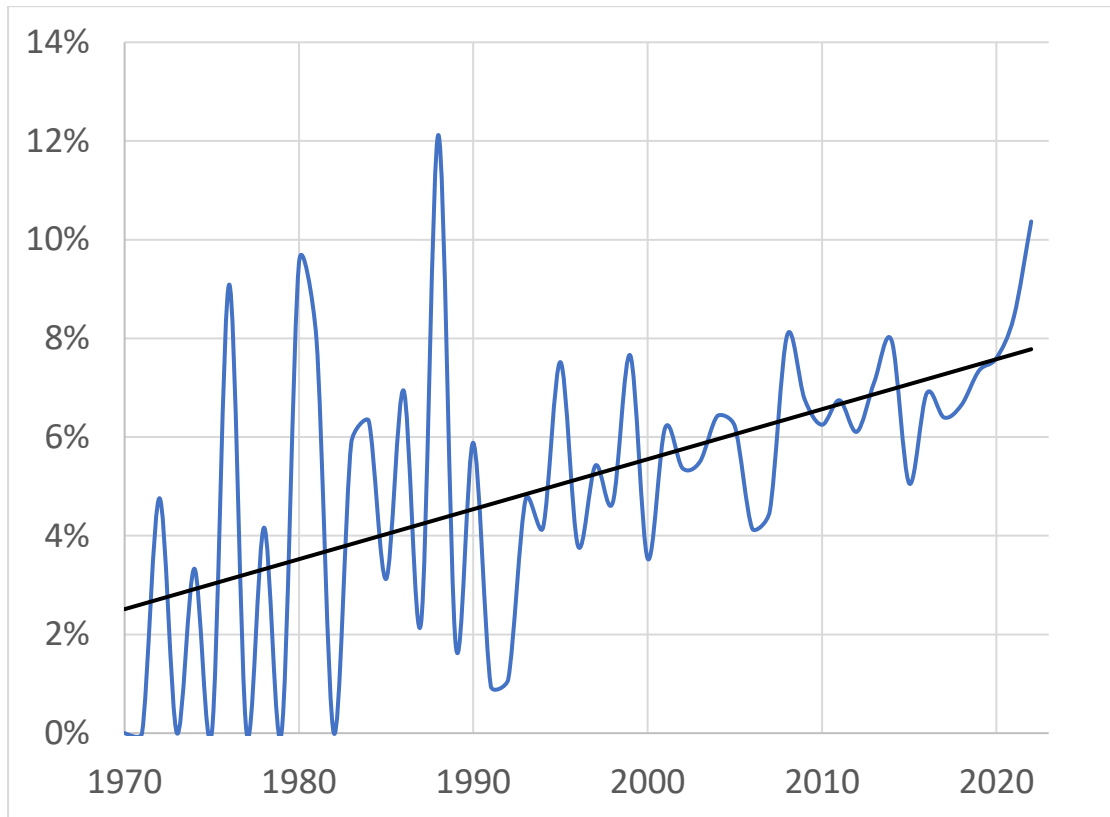
- CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams), μεθοδολογία υπολογιστικής θερμοδυναμικής για την πρόβλεψη διαγραμμάτων φάσεων [1].
- Μοντέλα πρόβλεψης εξέλιξης της μικροδομής με την μέθοδο Phase-Field [2].
- Μοντέλα μηχανικής συνεχούς μέσου για την πρόβλεψη της πλαστικής συμπεριφοράς του υλικού, ή αλλιώς προσομοιώσεις κρυσταλλικής πλαστικότητας (Crystal Plasticity Simulations) [3].

Αντικείμενο της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας είναι η ανάδειξη μεθόδων που μπορούν να οδηγήσουν σε βελτίωση, της τελευταίας προσέγγισης. Αποτελείται από δύο διακριτά μέρη, ένα μακροσκοπικού επιπέδου, το οποίο εφαρμόζει τις αρχές της συνεχούς μηχανικής, πάνω σε μικροσκοπικού επιπέδου μοντέλο το οποίο προσομοιώνει την μικροδομή, περιέχοντας γεωμετρικές και κρυσταλλογραφικές πληροφορίες αυτής [4]. Τα μοντέλα προσομοίωσης της μικροδομής, ονομάζονται Στοιχεία Αντιπροσωπευτικού Όγκου (Representative Volume Elements, RVEs). Η βασική αρχή που διέπει τα RVEs είναι ότι αυτά πρέπει να περιέχουν αρκετές πληροφορίες της μικροδομής, όμως να έχουν μέγεθος σημαντικό μικρότερο από αυτό του δοκιμίου [4, 5].

Πειραματικά, η μεθοδολογία κατασκευής των RVEs περιλαμβάνει χρήση του Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (Scanning Electron Microscope, S.E.M.), και της Περίθλασης Οπισθοσκεδαζόμενων Ηλεκτρονίων (E.B.S.D.). Πιο συγκεκριμένα, η παραγωγή δεδομένων μπορεί να πραγματοποιηθεί με δύο τρόπους [4, 6]:

- Με μια σειρά παράλληλων σαρώσεων του δοκιμίου (serial-sectioning or slicing), που οδηγεί σε μια σχεδόν ταυτόσημη αναπαράσταση της μικροδομής (Real Representative Volume Element, rRVE).
- Με 3 σαρώσεις, κατά τους ορθο-κανονικούς άξονες, με σκοπό την λήψη στατιστικών δεδομένων της μικροδομής και δημιουργίας στατιστικώς ισοδύναμου Στοιχείου Αντιπροσωπευτικού Όγκου (Statistically Representative Volume Element, sRVE)

Τα τελευταία χρόνια, παρατηρείται μια αύξηση των βιβλιογραφικών αναφορών που αφορούν στην μελέτη φαινομένων κόπωσης και ερπυσμού, στις προσομοιώσεις της κρυσταλλικής πλαστικότητας [7].

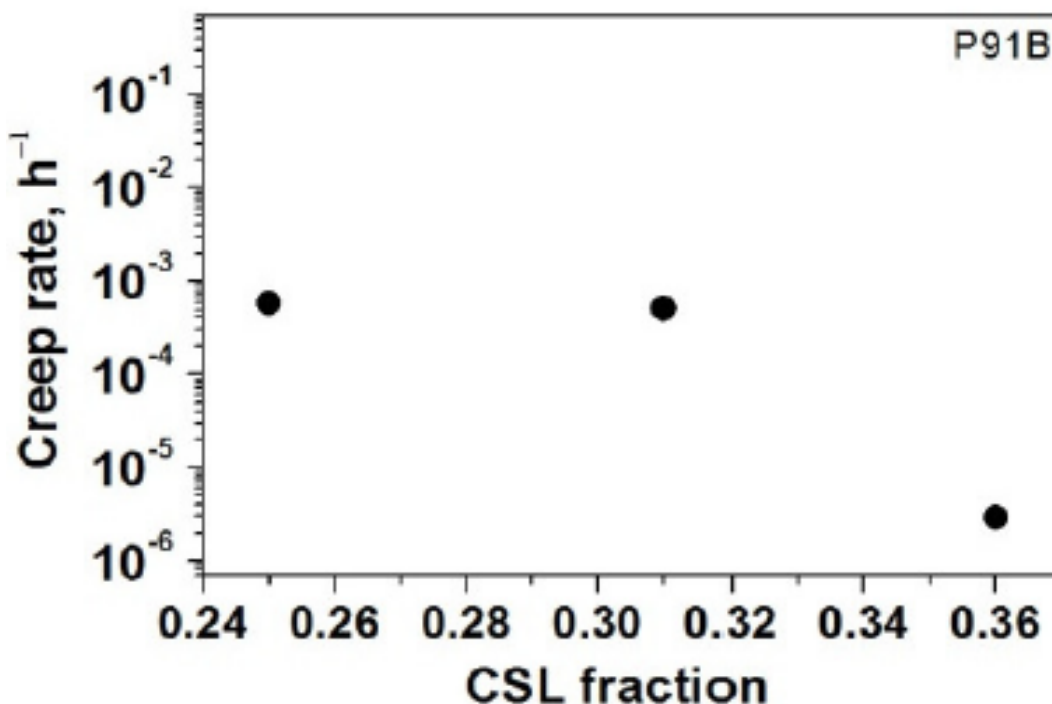


Διάγραμμα 1: Ποσοστό βιβλιογραφικών αναφορών που αφορούν την ανάλυση φαινομένων κόπωσης σε προσομοιώσεις κρυσταλλικής πλαστικότητας, ως προς το σύνολο το σύνολο των αναφορών για προσομοιώσεις CP [7].

Τα όρια των κόκκων έχουν σημαντική επίδραση στην συμπεριφορά ενός υλικού υπό συνθήκες κόπωσης. Πιο συγκεκριμένα, έχει αναφερθεί ότι η ύπαρξη συγκεκριμένων τύπων ορίων κόκκων, και ειδικότερα όρια κόκκου που περιγράφονται από το μοντέλο Πλέγματος Ταυτόσημων Θέσεων (Coincidence Site Lattices, CSLs), με χαμηλή τιμή  $\Sigma$ , δρουν βελτιωτικά σε μια σειρά από φαινόμενα, όπως:

- Διάδοση ρωγμής λόγω κόπωσης (Fatigue Crack Propagation) [8]
- Αντοχή σε ερπυσμό (Creep Strength) [9]
- Περικρυσταλλική διάβρωση (Intergranular Corrosion) και Stress Corrosion Cracking [9, 10]

Για παράδειγμα, στην Εικόνα 1, φαίνεται η ταπείνωση του ρυθμού ερπυσμού (Creep Rate) με την αύξηση του κλάσματος CSL (CSL Fraction).



Εικόνα 1: Διάγραμμα ρυθμού ερπυσμού συναρτήσει το λόγου ορίου CSL/συνολικά όρια (CSL Fraction) για χάλυβα P91 [9].

Με την εξέλιξη των απαιτήσεων για αντοχή των υλικών σε ακραίες και μη συνθήκες, προκύπτει η ανάγκη, τα μοντέλα προσομοίωσης της μικροδομής, να λαμβάνουν υπ'όψιν τους παραμέτρους που αφορούν τα όρια κόκκου. Αυτό αποτελεί και στόχο της παρούσας ΔΕ, την ανάπτυξη μιας μεθόδου η οποία θα βελτιστοποιεί την Συνάρτηση Κανανομής Διαφορών Προσανατολισμού (Misorientation Distribution Function) της προσομοιωμένης μικροδομής, σε σχέση με μια πειραματική.

Το κύριο σώμα της εργασίας, χωρίζεται σε δύο διακριτά μέρη. Το θεωρητικό, στο οποίο πραγματοποιείται ανάλυση των μαθηματικών εργαλείων και το υπολογιστικό, και χώρων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή, των ορίων κόκκων, το προσανατολισμό αυτών και του ιστού ενός πολυκρυσταλλικού υλικού.

Στο υπολογιστικό μέρος, γίνεται αναφορά στις βασικές αρχές που διέπουν την δημιουργία ενός RVE με το λογισμικό «DRAGen». Στην συνέχεια, περιγράφονται οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν και παρουσιάζονται τα αποτελέσματα αυτών, σε δύο υλικά.

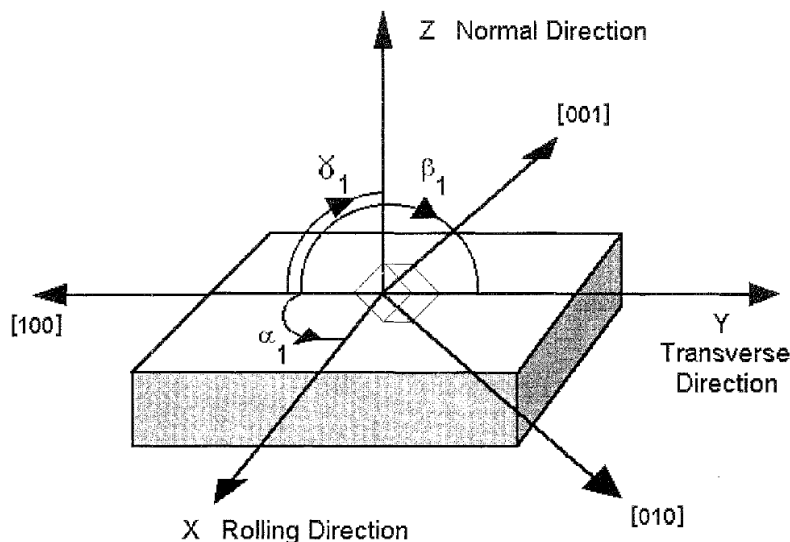
## 2. Θεωρητικό Μέρος

### 2.1 Προσανατολισμός

#### 2.1.1 Εισαγωγή

**Μ**εγάλο μέρος των υλικών που χρησιμοποιεί σε καθημερινή βάση ο άνθρωπος για μια σειρά από εφαρμογές, ανήκουν στην κατηγορία των κρυσταλλικών υλικών, που διαθέτουν δηλαδή μια συνεχή επανάληψη μιας στοιχειώδους διάταξης ατόμων (μοναδιαία κυψελίδα) σε όλη την έκτασή τους. Στην περίπτωση των μεταλλικών υλικών, λόγω της πυρήνωσης (nucleation) κόκκων, η οποία πραγματοποιείται σε πολλά σημεία κατά την στερεοποίηση και της ταυτόχρονης ανάπτυξής τους, το υλικό αποτελείται από ένα μοτίβο μοναδιαίων κυψελίδων διαφορετικών κρυσταλλογραφικών προσανατολισμών (crystal aggregates). Οι κρύσταλλοι (crystals) μετατρέπονται σε κόκκους (grains) όταν στοιχίζονται πολλοί μαζί προς μια κρυσταλλογραφική διεύθυνση. Έτσι, τα υλικά που τους περιέχουν ονομάζονται πολυκρυσταλλικά (polycrystalline). Με συγκεκριμένες τεχνικές χύτευσης είναι δυνατόν να παραχθούν υλικά, τα οποία αποτελούνται αποκλειστικά από ένα κρύσταλλο (μονοκρυσταλλικά, single crystal) [11]. Εφαρμογή τέτοιων τεχνικών πραγματοποιείται σε ορισμένες κατηγορίες υπερκραμάτων νικελίου [12].

Εδώ εμφανίζεται μια πρόκληση κατά την μελέτη και τον σχεδιασμό των πολυκρυσταλλικών υλικών, καθώς τα φύτρα ακολουθούν διαφορετικές διευθύνσεις ανάπτυξης, οι οποίες εξαρτώνται από τον ρυθμό και την διεύθυνση απαγωγής της θερμότητας [12]. Ως εκ τούτου, οι κόκκοι που προκύπτουν κατά την ολοκλήρωση της στερεοποίησης, παρουσιάζουν διαφορές ως προς το σχήμα και την θέση τους σε σχέση με κάποιο σύστημα αξόνων. Το σύστημα αξόνων (ή σύστημα αναφοράς, reference frame) συνήθως επιλέγεται μακροσκοπικά, βάσει της γεωμετρίας του δοκιμίου (Εικόνα 1).



Εικόνα 2: Σχέση μεταξύ των συστημάτων αναφοράς κρυστάλλου και δοκιμίου για φύλλο έλασης [5].

Για παράδειγμα, σε προϊόντα έλασης (Εικόνα 1), το σύστημα αξόνων ορίζεται από την διεύθυνση της έλασης (rolling direction, RD), την κάθετη σε αυτήν (normal direction, ND), και την διεύθυνση κάθετη στο φύλλο (transverse direction, TD) [12, 13, 14, 15]. Η σχετική θέση του συστήματος αξόνων των κρυστάλλων (crystal frame), όπου, για παράδειγμα, το κυβικό σύστημα ορίζεται από τις κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις [100], [010], [001], σε σχέση με το σύστημα αναφοράς, ονομάζεται προσανατολισμός του κρυστάλλου (orientation). Στην Εξίσωση 1 εκφράζεται μαθηματικώς ο προσανατολισμός ενός κόκκου.

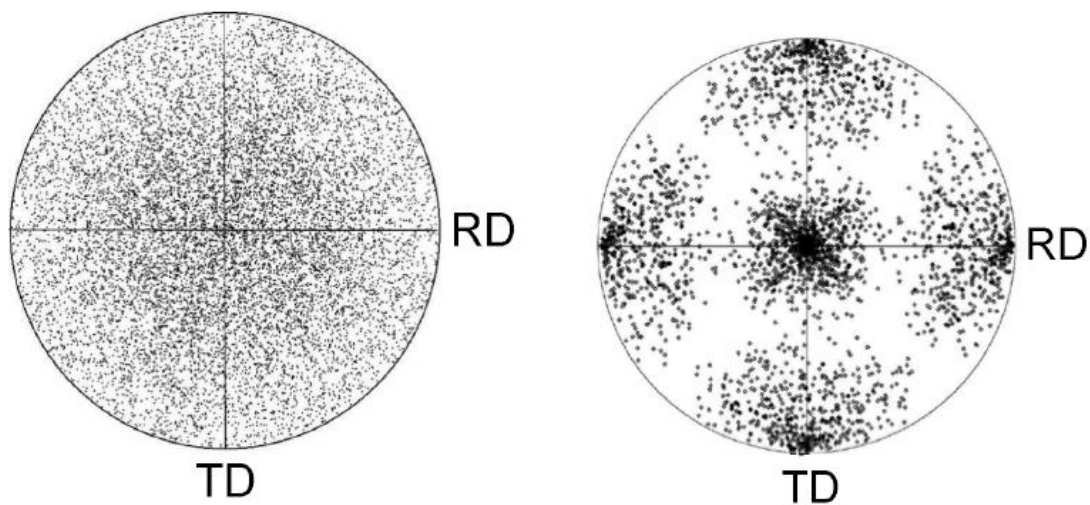


$$C_C = g \cdot C_S$$

Εξίσωση 1: Μαθηματική έκφραση προσανατολισμού κόκκου [15, 16].

όπου,  $C_C$  και  $C_S$  τα συστήματα αναφοράς του κρυστάλλου και του δοκιμίου αντίστοιχα, και  $g$  ο προσανατολισμός [15, 16].

Στα μεταλλικά υλικά, λόγω των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά την χύτευση, αρχικώς, η κατανομή των προσανατολισμών των κόκκων δεν μπορεί να είναι απολύτως τυχαία (randomly oriented) εξαιτίας της κατευθυνόμενης ανάπτυξης. Αντίστοιχα, στην περίπτωση όπου υπάρχουν στάδια παραγωγή που εμπεριέχουν, όπως π.χ. η έλαση, τα επίπεδα ολίσθησης τείνουν να ευθυγραμμίζονται με τις εξωτερικές δυνάμεις, δίνοντας σε αρκετούς κόκκους του δοκιμίου, συγκεκριμένους προσανατολισμούς [12]. Το σύνολο των προσανατολισμών των κόκκων του δοκιμίου, ονομάζεται κρυσταλλογραφικός ιστός (crystallographic texture) ή απλώς ιστός [12, 13, 15, 16].



Εικόνα 3: Στερεογραφικές προβολές πολυκρυσταλλικού υλικών 500 κρυστάλλων: τυχαία προσανατολισμένου (αριστερά), με ύπαρξη κρυσταλλογραφικού ιστού (δεξιά) [1].

Τα περισσότερα πολυκρυσταλλικά υλικά εμφανίζουν ιστό, ως αποτέλεσμα των πολλών σταδίων κατεργασίας στα οποία υπόκεινται. Εκτός της χύτευσης και της μορφοποίησης, επίδραση στον κρυσταλλογραφικό ιστό, έχουν επίσης οι θερμικές κατεργασίες ανακρυστάλλωσης και οι μετασχηματισμοί φάσεων [17, 18]. Από τον κρυσταλλογραφικό ιστό εξαρτώνται ιδιότητες όπως [16]:

- Το μέτρο ελαστικότητας του Young
- Ο λόγος του Poisson
- Η αντοχή
- Η ολκιμότητα
- Η επιδεκτικότητα στην διαμόρφωση
- Η δυσθραυστότητα
- Η μαγνητική διαπερατότητα
- Η ηλεκτρική αγωγιμότητα
- Ο συντελεστής θερμικής διαστολής (σε μη κυβικά μεταλλικά υλικά)

### 2.1.2 Πίνακες Περιστροφής ή Προσανατολισμού

Βάσει των όσων αναφέρθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, είναι αντιληπτό ότι ο προσδιορισμός του προσανατολισμού εμπεριέχει κάποια νοητή περιστροφή του ενός συστήματος αξόνων προς κάποιο αντίστοιχο το οποίο παραμένει σταθερό, το σύστημα αξόνων του κρυστάλλου και του δοκιμίου αντίστοιχα. Ο πιο βασικός τρόπος μαθηματικής αναπαράστασης μιας περιστροφής είναι μέσω πινάκων  $3 \times 3$ . Κάθε γραμμή περιέχει τα συνημίτονα των γωνιών που σχηματίζονται μεταξύ των αξόνων των συστημάτων κρυστάλλου και δοκιμίου [13]. Για παράδειγμα, η πρώτη γραμμή ενός τέτοιου πίνακα, αποτελείται από τα συνημίτονα των γωνιών που σχηματίζονται μεταξύ της  $[100]$  με τους άξονες X,Y,Z του δοκιμίου (Εικόνα 2  $\rightarrow \alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ ). Ολοκληρωμένη μορφή του πίνακα περιστροφής φαίνεται στην Εξίσωση 2.

$$g = \begin{pmatrix} \cos\alpha_1 & \cos\beta_1 & \cos\gamma_1 \\ \cos\alpha_2 & \cos\beta_2 & \cos\gamma_2 \\ \cos\alpha_3 & \cos\beta_3 & \cos\gamma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}$$

Εξίσωση 2: Πίνακας Περιστροφής ή Προσανατολισμού [14].

Εναλλακτικά, τα στοιχεία του πίνακα προσανατολισμού, μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει της γωνίας περιστροφής του άξονα x,y ή z (Εξίσωση 3).

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R_y = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R_z = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Εξίσωση 3: Πίνακας Προσανατολισμού συναρτήσει της γωνίας περιστροφής των αξόνων x, y και z [16].

Οι πίνακες αυτοί δίνουν τον όρο g στην Εξίσωση 1.

Στο κυβικό σύστημα, μια περιστροφή  $180^\circ$  της κυβικής μοναδιαίας κυψελίδας, δεν αποφέρει κάποιο διακριτό αποτέλεσμα καθώς η συγκεκριμένη περιστροφή αποτελεί στοιχείο σημειακής συμμετρίας (point group) [12]. Ωστόσο, από μαθηματική άποψη οι κρυσταλλογραφικοί άξονες (που αποτελούν το σύστημα συντεταγμένων του κρυστάλλου) έχουν μετακινηθεί ως αποτέλεσμα της νοητής περιστροφής και άρα, πλέον βρίσκονται σε διαφορετική θέση. Συνεπώς, είναι απαραίτητο κατά τον υπολογισμό του προσανατολισμού, να λαμβάνεται υπ'όψιν και η συμμετρία που εμφανίζει ο κρύσταλλος. Αυτό επιτυγχάνεται μαθηματικά μέσω της Εξίσωσης 4.

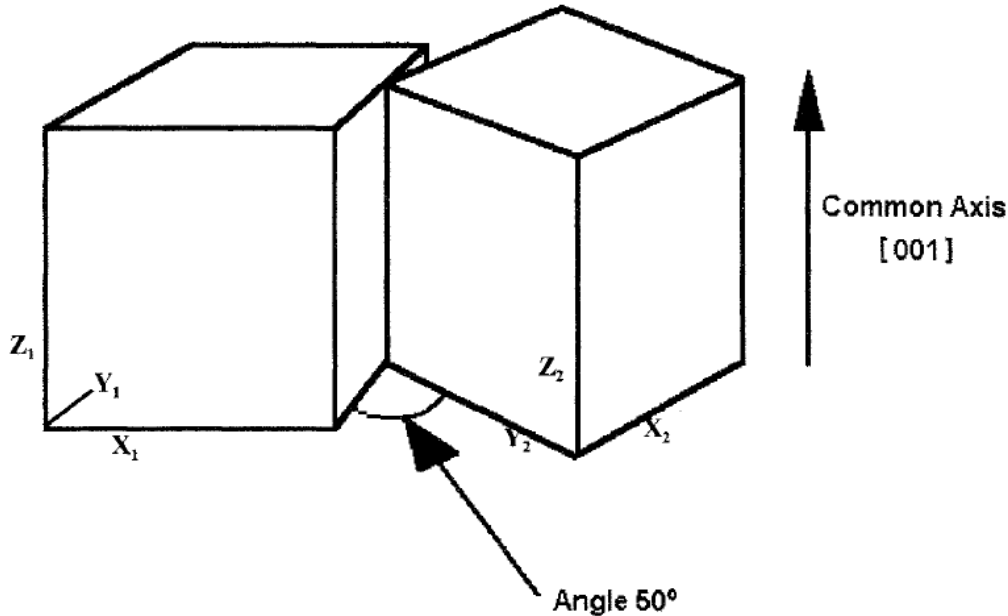
$$g' = T_i \cdot g$$

Εξίσωση 4: Υπολογισμός προσανατολισμού συναρτήσει της κρυσταλλικής συμμετρίας [16].

όπου  $T_i$ , οι πίνακες που αποτυπώνουν τις συμμετρικές ενέργειες (symmetry operations) που προκύπτουν από τα στοιχεία σημειακής συμμετρίας (point group symmetry elements), όπου, στην περίπτωση της κυβικής, ανέρχονται στα 24 (Παράρτημα)

2.1.3 Γωνία και Άξονας Περιστροφής

Σημαντικό ελάττωμα της περιγραφής του προσανατολισμού ενός κόκκου με την χρήση πινάκων είναι η αδυναμία εξαγωγής ευανάγνωστης αναπαράστασης για ερμηνεία των αποτελεσμάτων. Για τον λόγο αυτό, έχουν αναπτυχθεί μαθηματικοί χώροι, ώστε να εκφραστεί μια περιστροφή όσο το δυνατόν πιο συμπυκνωμένα. Παραδείγματα τέτοιων χώρων είναι ο χώρος Rodriguez-Frank, ο χώρος Euler και ο κυλινδρικός χώρος γωνία/άξονα περιστροφής [12, 15, 16].



Εικόνα 4: Σχηματική αναπαράσταση περιστροφής εκφρασμένης ως ζευγάρι γωνίας/άξονα [4]

Ο απλούστερος τρόπος να αποδοθεί μια περιστροφή είναι μέσω του ζευγαριού γωνίας/άξονα. Όπως φαίνεται στην Εικόνα 4, ως σύστημα αναφοράς ορίζεται το  $(X_1, Y_1, Z_1)$ . Παρατηρείται ότι το σύστημα αξόνων  $(X_2, Y_2, Z_2)$  σχηματίζει γωνία με  $50^\circ$  ίση με σε σχέση με το σύστημα αναφοράς, με άξονα περιστροφής τον  $[001]$ . Το ζευγάρι γωνίας/άξονα περιστροφής μπορεί να υπολογιστεί από τον πίνακα προσανατολισμού  $g$ , μέσω των Εξίσωση 5 Εξίσωση 6 Εξίσωση 7.

$$\cos \theta = \frac{\text{tr}(g) - 1}{2}$$

Εξίσωση 5: Υπολογισμός γωνίας περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού [15, 16]

$$r_1 = \frac{g_{23} - g_{32}}{2 \sin \theta}$$

$$r_2 = \frac{g_{31} - g_{13}}{2 \sin \theta}$$

$$r_3 = \frac{g_{12} - g_{21}}{2 \sin \theta}$$

Εξίσωση 6: Υπολογισμός δεικτών Miller  $(r_1, r_2, r_3)$  άξονα περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού [15, 16].

$$r_1 = \left( \frac{g_{11} - 1}{2} \right)^{1/2}$$

$$r_2 = \left( \frac{g_{22} - 1}{2} \right)^{1/2}$$

$$r_3 = \left( \frac{g_{33} - 1}{2} \right)^{1/2}$$

Εξίσωση 7: Υπολογισμός δεικτών Miller ( $r_1, r_2, r_3$ ) άξονα περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού, για  $\theta=0^\circ$  και  $\theta=180^\circ$  [15, 16].

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός, επιτυγχάνεται μέσω της Εξίσωσης 8.

$$g = \begin{pmatrix} r_1^2(1 - \cos \theta) + \cos \theta & r_1 r_2(1 - \cos \theta) - r_3 \sin \theta & r_1 r_3(1 - \cos \theta) + r_2 \sin \theta \\ r_2 r_1(1 - \cos \theta) + r_2 \sin \theta & r_2^2(1 - \cos \theta) + \cos \theta & r_2 r_3(1 - \cos \theta) - r_1 \sin \theta \\ r_3 r_1(1 - \cos \theta) - r_2 \sin \theta & r_3 r_1(1 - \cos \theta) + r_1 \sin \theta & r_3^2(1 - \cos \theta) + \cos \theta \end{pmatrix}$$

Εξίσωση 8: Υπολογισμός Πίνακα Προσανατολισμού μέσω του ζευγαριού γωνίας/άξονα.

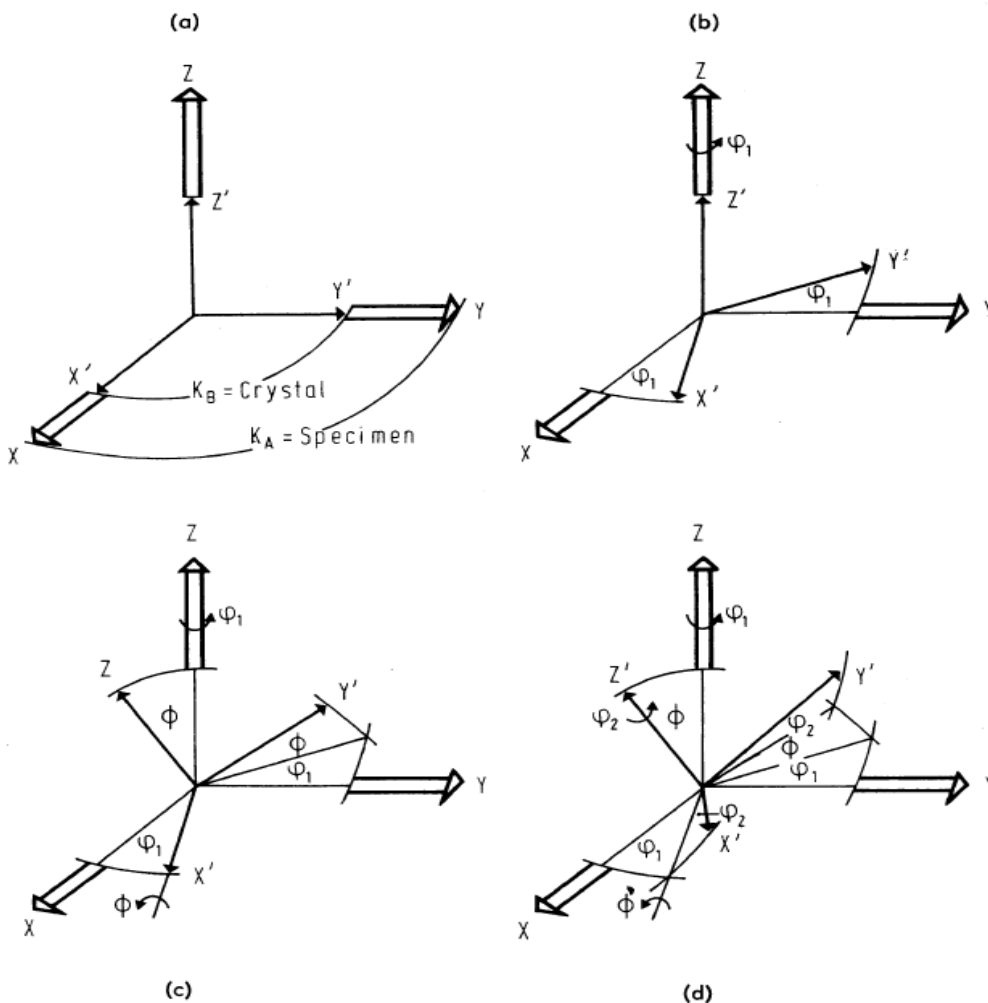
Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, ως συνέπεια της συμμετρίας του ανά περίπτωση εξεταζόμενου κρυσταλλογραφικού συστήματος, προκύπτουν 24 κρυσταλλογραφικώς ισοδύναμα ζευγάρια γωνιών/άξονα. Είναι σύνηθες στις απεικονίσεις των δεδομένων μικρο-και-μέσοιστου (micro-and-mesotexture) να χρησιμοποιείται εκείνο το οποίο κατέχει την μικρότερη γωνία (disorientation angle,  $\theta_d$ ), περιορίζοντας έτσι χώρους αναπαράστασης που μπορεί να εκτείνονται στο άπειρο [15].

#### 2.1.4 Χώρος Euler

Οι γωνίες Euler αποτελούν μια σειρά από 3 περιστροφές οι οποίες, εκτελώντας τες με την κατάλληλη σειρά, οδηγούν σε σύμπτωση των δύο συστημάτων αναφοράς. Στην βιβλιογραφία, υπάρχουν αρκετές αλληλουχίες περιστροφών, με την δημοφιλέστερη να αποτελεί αυτή του Bunge (Εικόνα 5) [13], κατά την οποία:

- Περιστροφή κατά γωνία  $\phi_1$  στην διεύθυνση ND, μετασχηματίζοντας την διεύθυνση RD σε RD' και την διεύθυνση TD σε TD' αντίστοιχα.
- Περιστροφή κατά γωνία  $\Phi$  γύρω από την διεύθυνση RD', μετασχηματίζοντας την διεύθυνση TD' σε TD'' και αντίστοιχα την διεύθυνση ND σε ND'

- Περιστροφή κατά  $\varphi_2$  στην διεύθυνση  $ND'$ , μετασχηματίζοντας την διεύθυνση  $RD'$  σε  $RD''$  και την διεύθυνση  $TD''$  σε  $TD'''$ .



Εικόνα 5: Γραφική αναπαράσταση του κατά Bunge υπολογισμού των γωνιών Euler [2].

Άλλες μεθοδολογίες υπολογισμού αυτών των γωνιών που έχουν αναπτυχθεί είναι οι [15, 16]:

- Matthies
- Kocks
- Canova
- Roe

Για τον υπολογισμό των πινάκων προσανατολισμού, πρέπει να ληφθούν υπ'όψιν και οι 3 περιστροφές που ορίζονται από τις γωνίες Euler. Στην κατά Bunge προσέγγιση, πραγματοποιούνται δύο περιστροφές στους άξονες Z και μια κατά τον άξονα X. Ο προκύπτουν πίνακας, φαίνεται στην Εξίσωση 9.

$$g = g_{\varphi_1} \cdot g_{\Phi} \cdot g_{\varphi_2} = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\Phi & \sin\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\Phi & \sin\varphi_2 \sin\Phi \\ -\cos\varphi_1 \sin\varphi_2 - \sin\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\Phi & -\sin\varphi_1 \sin\varphi_2 + \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\Phi & \cos\varphi_2 \sin\Phi \\ \sin\varphi_1 \sin\Phi & -\cos\varphi_1 \sin\Phi & \cos\Phi \end{pmatrix}$$

Εξίσωση 9: Πίνακας Προσανατολισμού εκφρασμένου σε γωνίες Euler [12, 13, 15, 16].

Οι γωνίες Euler αποτελούν περιοδικές ποσότητες με περίοδο  $2\pi$ . Αυτό μαθηματικά εκφράζεται ως:

$$g\{\varphi_1 + 2\pi, \Phi + 2\pi, \varphi_2 + 2\pi\} = g\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$$

Εξίσωση 10: Περιοδικότητα γωνιών Euler [13, 18].

Με την βοήθεια της Εξίσωσης 10, μπορεί να επιβεβαιωθεί η παρακάτω ταυτότητα.

$$g\{\varphi_1 + \pi, 2\pi - \Phi, \varphi_2 + \pi\} = g\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$$

Εξίσωση 11: Πεδίο ορισμού γωνιών Euler [13, 18].

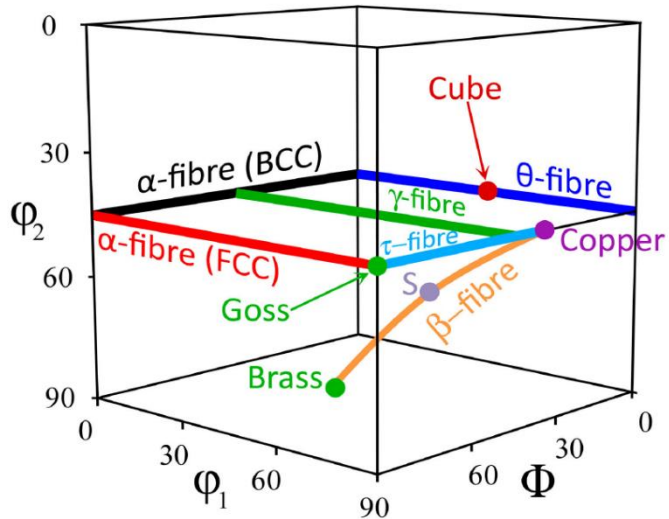
Βάσει της Εξίσωσης 11, το πεδίο ορισμού των γωνιών Euler διαμορφώνεται ως:

- $0^\circ \leq \varphi_1, \varphi_2 \leq 360^\circ$
- $0^\circ \leq \Phi \leq 180^\circ$

Συνεπώς, ένας προσανατολισμός οποίος εκφράζεται σε γωνίες Euler αποτελεί σημείο στον τρισδιάστατο χώρο που δημιουργείται από το πεδίο ορισμού των  $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ , ο οποίος ονομάζεται χώρος Euler. Λαμβάνοντας υπ' όψιν το μακροσκοπικό σύστημα αναφοράς καθώς και τα στοιχεία σημειακής συμμετρίας του συστήματος κρυστάλλωσης του υλικού, ο χώρος του Euler μπορεί να διακριτοποιηθεί σε μικρότερους ισοδύναμους χώρους. Για παράδειγμα, στην περίπτωση της έλασης μετάλλου κυβικού συστήματος κρυστάλλωσης, το πεδίο ορισμού μπορεί να περιοριστεί στο διάστημα  $0^\circ \leq \varphi_1, \Phi, \varphi_2 \leq 90^\circ$ . Για λόγους παραγωγής ευδιάκριτων αποτελεσμάτων, προτιμάται η δισδιάστατη απεικόνιση κατανομής προσανατολισμών στον χώρο του Euler, κατά μήκος κάποιου άξονα, συνήθως του  $\varphi_2$ . Η τοποθέτηση όλων των προσανατολισμών μιας μικροδομής στον χώρο του Euler, θα οδηγούσε στην δημιουργία ενός δυσδιάκριτου «νέφους». Για τον λόγο αυτό, χρησιμοποιείται η μέθοδος συνάρτησης κατανομής προσανατολισμών, βασική αρχή της οποίας αποτελεί η Εξίσωση 12:

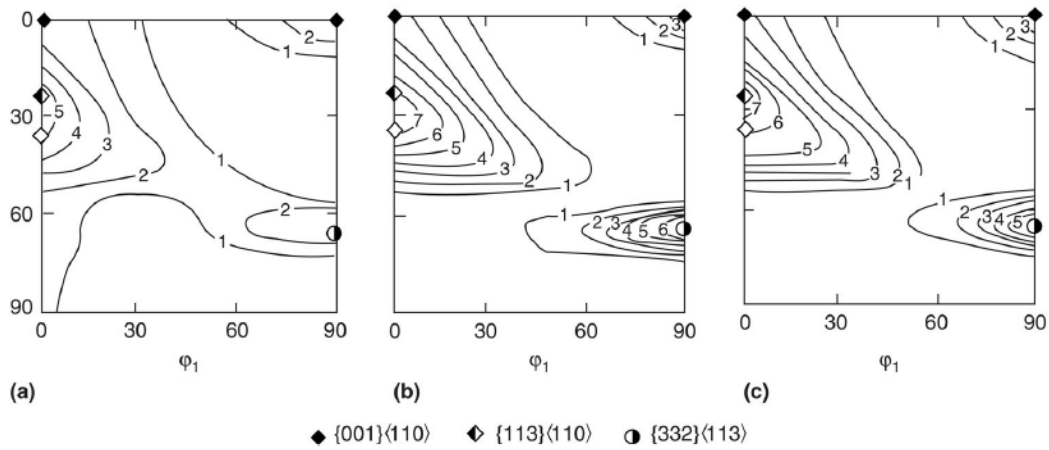
$$f(g)dg = \frac{dV}{V}$$

Εξίσωση 12: Συνάρτηση κατανομής προσανατολισμών [16].



Εικόνα 6: Τρισδιάστατη απεικόνιση χαρακτηριστικών ινών και κρυσταλλογραφικών συστατικών στον χώρο του Euler [3].

όπου  $dV$  το κλάσμα όγκου δεδομένου κρυσταλλογραφικού συστατικού,  $V$  ο συνολικός όγκος του υλικού και  $d\theta$  η μέγιστη γωνία απόκλισης του προσανατολισμού, η οποία εξαρτάται από την διακύμανση των τριών γωνιών Euler. Παράδειγμα τέτοιων διαγραμμάτων, που προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου, φαίνονται στην Εικόνα 7.



Εικόνα 7: Συνάρτηση κατανομής προσανατολισμών φύλλου έλασης χάλυβα με: (a) ισαξονικό φερρίτη, (b) βελονοειδή φερρίτη (c) μαρτενσίτη για  $\varphi_2=45^\circ$  [14].

Στον Πίνακα 1 φαίνονται οι πιο χαρακτηριστικές ίνες και κρυσταλλογραφικά χαρακτηριστικά που συναντώνται στα μέταλλα των κυβικών συστημάτων.

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικές ίνες και κρυσταλλογραφικά συστατικά μετάλλων κυβικού συστήματος (BCC & FCC) [14, 17].

Ίνα	Δείκτες Miller	Γωνίες Euler ( $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ )
$\alpha$ (FCC)	$\langle 110 \rangle // ND$	
$\alpha$ (BCC)	$\langle 110 \rangle // RD$	
$\beta$ (FCC)	-	
$\beta$ (BCC)	$\langle 111 \rangle$ close to ND	
$\gamma$	$\langle 111 \rangle // ND$	
$\epsilon$	$\langle 011 \rangle // TD$	
$\zeta$	$\langle 011 \rangle // ND$	

$\eta$	$\langle 011 \rangle // RD$	
$\theta$	$\langle 100 \rangle // ND$	
$\tau$	$\langle 110 \rangle // TD$	
<b>Κρυσταλλογραφικό Συστατικό</b>		
<b>Copper</b>	$[112] \langle 111 \rangle$	90, 35, 45
<b>S</b>	$[123] \langle 634 \rangle$	59, 37, 63
<b>Goss</b>	$[011] \langle 100 \rangle$	0, 45, 90
<b>Brass</b>	$[011] \langle 211 \rangle$	35, 40, 90
<b>Dillamore</b>	$[4\ 4\ 11] \langle 11\ 11\ 8 \rangle$	90, 27, 45
<b>Cube</b>	$[001] \langle 100 \rangle$	0, 0, 0

### 2.1.5 Χώρος Rodriguez-Frank

Η περιγραφή ενός προσανατολισμού μέσω των διανυσμάτων Rodriguez, αποτελεί, όπως και στην περίπτωση των γωνιών Euler, μια τρισδιάστατη απεικόνιση ενός προσανατολισμού ή διαφορών προσανατολισμού. Η διαφορά σε σχέση με την απεικόνιση στον χώρο του Euler έγκειται στο γεγονός ότι στην αντίστοιχη του Rodrigues-Frank (Rodrigues-Frank Space, RF), τα διανύσματα  $R$  δεν αποτελούν προϊόν τριών διαδοχικών περιστροφών, όπως οι γωνίες Euler, αλλά προκύπτουν απευθείας από το ζευγάρι γωνίας/άξονα, μέσω της Εξίσωσης 13 [19, 20, 21, 22, 23].

$$R_1 = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) r_1$$

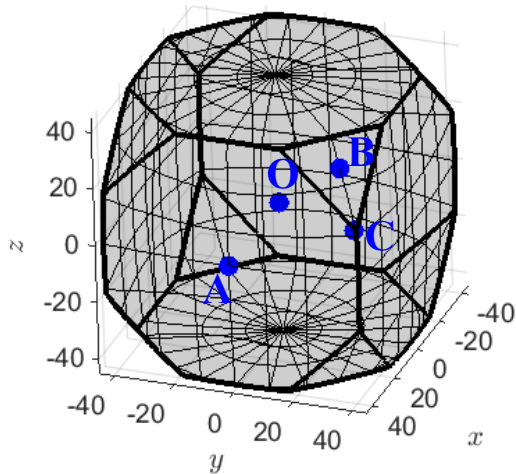
$$R_2 = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) r_2$$

$$R_3 = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) r_3$$

Εξίσωση 13: Υπολογισμός στοιχείων διανύσματος Rodriguez για δεδομένη γωνία και άξονα περιστροφής για  $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$  [16].



Οι τρεις συνιστώσες  $R_1$ - $R_2$ - $R_3$  ορίζουν το διάνυσμα Rodriguez (R) το οποίο βρίσκεται εντός Καρτεσιανού συστήματος. Οι άξονες του R ορίζονται είτε από αυτούς του δοκιμίου (για αναπαράσταση δεδομένων προσανατολισμού) είτε του κρυστάλλου (για αναπαράσταση δεδομένων διαφορών προσανατολισμών κόκκων) [16].



Εικόνα 8: Θεμελιώδης Ζώνη κυβικής συμμετρίας με απεικόνιση σημαντικών σημείων εντός αυτής.

Βάσει της Εξίσωση 13, γίνεται αντιληπτό ότι για αυξανόμενη  $\theta$ , ο χώρος Rodriguez-Frank εκτείνεται στο άπειρο, γεγονός που τον καθιστά δύσκριστο χωρίς παρεμβάσεις και παραδοχές. Χρησιμοποιώντας την συμμετρία, ο απειροστός χώρος Rodriguez-Frank μπορεί να περιοριστεί για κάθε ένα από αυτά, σε έναν υπό-χώρο που καλείται θεμελιώδης ζώνη (Fundamental Zone, FZ), εντός της οποίας μπορεί να περιγράψει οποιοσδήποτε προσανατολισμός, χρησιμοποιώντας αυτόν με την μικρότερη γωνία περιστροφής (disorientation) από τους 24 κρυσταλλογραφικά ισοδύναμους (για το κυβικό σύστημα) [23]. Στο κυβικό σύστημα, η θεμελιώδης ζώνη φαίνεται στην Εικόνα 8, και αποτελείται από 6 οκτάεδρα και 8 ισόπλευρα

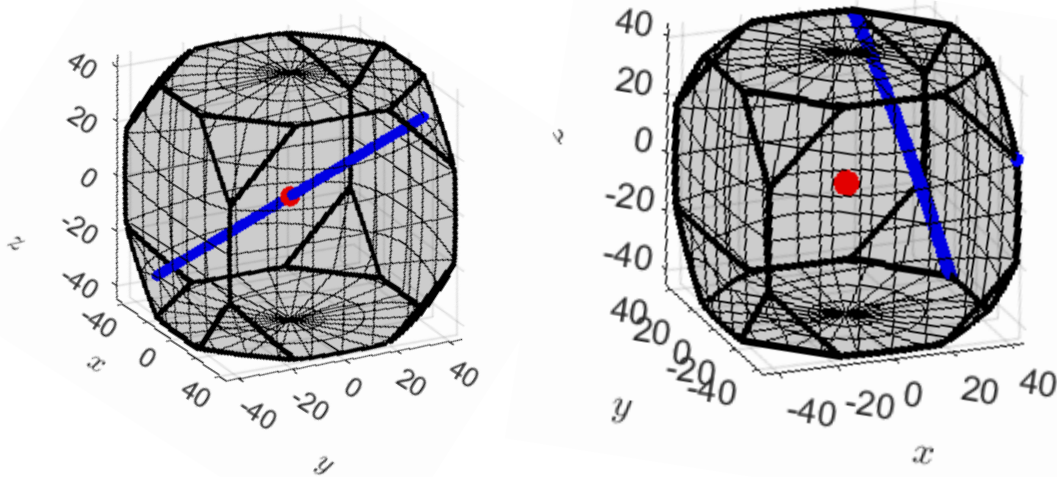
τρίγωνα. Τα πιο σημαντικά σημεία της θεμελιώδους ζώνης, φαίνονται στον Πίνακας 2 [16, 20].

Πίνακας 2: Σημαντικότερα σημεία στην Θεμελιώδη Ζώνη της κυβικής συμμετρίας, όπως αυτά φαίνονται στην Εικόνα 8 [15].

Σημείο	Στοιχεία R	Ζευγάρι Γωνίας/Άξονα	Παρατηρήσεις
<b>O</b>	(0,0,0)	0°, ( $\infty, \infty, \infty$ )	Αρχή χώρου Rodriguez-Frank
<b>A</b>	(0.4142,0,0)	45°, (100)	Απόσταση αρχής με κέντρο οκταέδρου.
<b>B</b>	(0.333,0.333,0.333)	60°, (111)	Μέγιστη πιθανή γωνία περιστροφής (disorientation) στον άξονα (111) [20].
<b>C</b>	(0.4124,0.4124,0.1716)	62.8°, (1,1, $\sqrt{2}$ -1)	Μέγιστη γωνία περιστροφής στο κυβικό σύστημα [16].

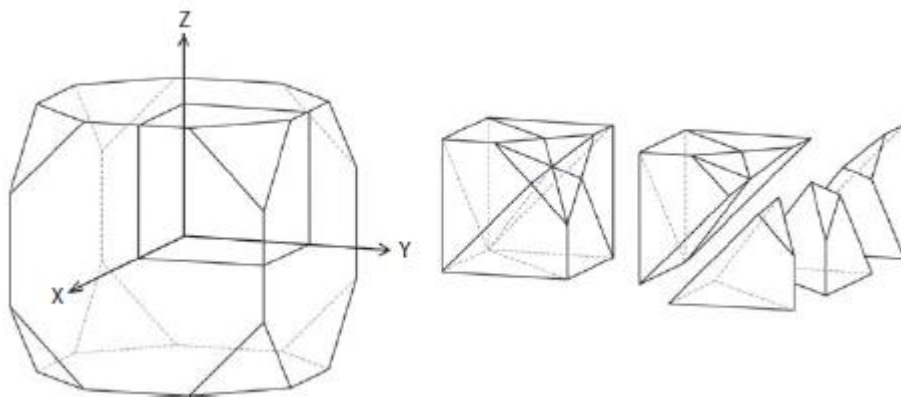
Προσανατολισμοί ή διαφορές προσανατολισμού που έχουν κοινό άξονα περιστροφής, στον χώρο Rodriguez-Frank, βρίσκονται εντός του ίδιου ευθύγραμμου τμήματος το οποίο ξεκινά από την αρχή (O) και τέμνει τα όρια της θεμελιώδους ζώνης, με την ακριβή θέση αναπαράστασης, να εξαρτάται από την γωνία περιστροφής. Αντίθετα, προσανατολισμοί οι

οποίοι αποτελούν μέρος ίνας, πάλι αποτυπώνονται πάνω σε κοινό ευθύγραμμο τμήμα στην συγκεκριμένο χώρο, χωρίς όμως αυτό να τέμνει την αρχή (O) [16].



Εικόνα 9: Προσανατολισμοί με άξονα περιστροφής (111) (αριστερά) και προσανατολισμοί της  $\gamma$ -fibre (δεξιά) (Με κόκκινο, η αρχή του χώρου Rodriguez-Frank).

Η Θεμελιώδης Ζώνη του κυβικού συστήματος μπορεί να χωριστεί περαιτέρω σε 8 κυβοειδή με κάθε ένα από τα ισόπλευρα τρίγωνα στην μια τους ακμή. Τα συγκεκριμένα κυβοειδή, αποδομούνται σε 8 πυραμιδοειδή σχήματα, τα οποία στην διεθνή βιβλιογραφία φέρουν το όνομα «κελιά MacKenzie (MacKenzie Cell)» [21]. Τα κελιά αυτά χρησιμοποιούνται για την αναπαράσταση δεδομένων διαφορών προσανατολισμού κόκκων, αξιοποιώντας κατά αυτόν τον τρόπο, μόνο το 1/48 της θεμελιώδους ζώνης [22].



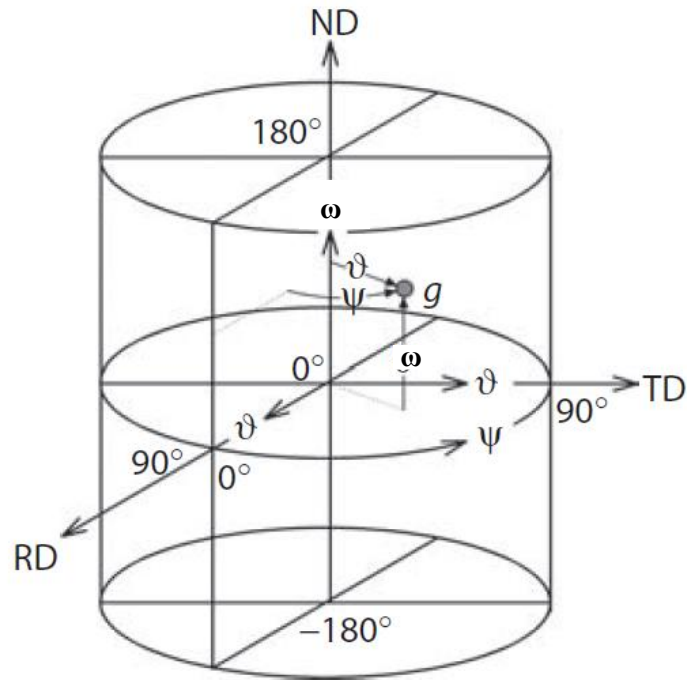
Εικόνα 10: Αποδόμηση Θεμελιώδους Ζώνης κυβικής συμμετρίας σε κυβοειδή και πυραμιδοειδή [5].

### 2.1.6 Κυλινδρικός Χώρος Γωνία/Άξονα

Χρησιμοποιώντας το σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων και το ζευγάρι γωνίας/άξονα περιστροφής, μπορεί να επιτευχθεί η περιγραφή ενός προσανατολισμού, σε έναν τρισδιάστατο χώρο, ο οποίος ονομάζεται κυλινδρικός χώρος γωνίας-άξονα, εξαιτίας του σχήματος του [24]. Οι τρεις παράμετροι του χώρου είναι οι εξής [16]:

- Η γωνία περιστροφής, όπου στον συγκεκριμένο χώρο, συμβολίζεται ως  $\omega$

- Οι σφαιρικές συντεταγμένες  $\theta$  και  $\psi$ , του άξονα περιστροφής

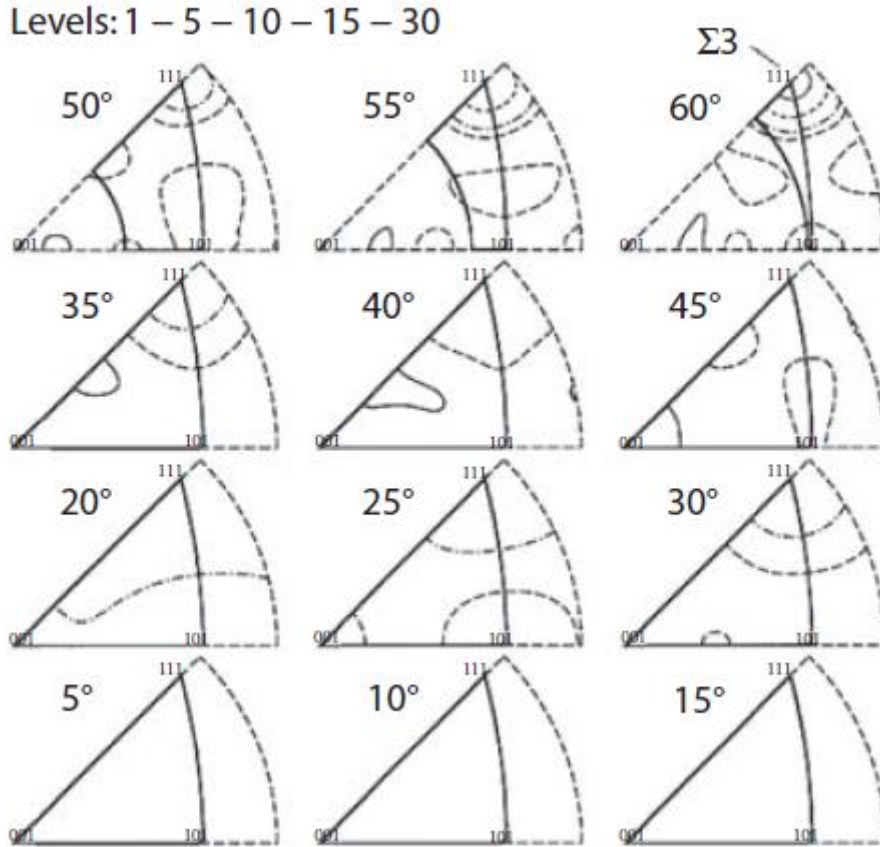


Εικόνα 11: Ο κυλινδρικός χώρος γωνίας-άξονα [16].

$$r_x = \cos \psi \sin \theta, r_y = \sin \psi \cos \theta, r_z = \cos \theta$$

Εξίσωση 14: Μετατροπή σφαιρικών συντεταγμένων  $\theta$  και  $\psi$ , σε δείκτες Miller άξονα περιστροφής [16].

Η προβολή δεδομένων στον συγκεκριμένο χώρο πραγματοποιείται μέσω στερεογραφικής προβολής των γωνιών  $\theta$  και  $\psi$ , για τμήματα του χώρου, κατά τον άξονα  $\omega$  (Εικόνα 12) [24].



Εικόνα 12: Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού δοκίμιο νικελίου κυκλικής φόρτισης, στον κυκλινδρικό χώρο γωνίας/άξονα [16].

### 2.1.7 Τετραδόνια

Η μαθηματική αποτύπωση ενός προσανατολισμού μπορεί να επιτευχθεί και με μαθηματικές προσεγγίσεις που κάνουν χρήση του τετραδιάστατου Ευκλείδειου χώρου ( $R^4$ ), και πιο συγκεκριμένα, τα τετραδόνια (quaternions). Πρόκειται για διανύσματα του συγκεκριμένου χώρου, όπου έχουν την μορφή  $q=(q_0,q_1,q_2,q_3)$ , με το  $q_0$  να αποτελεί το βαθμωτό μέρος και τα  $(q_1,q_2,q_3)$ , το διανυσματικό [15]. Τα συγκεκριμένα διανύσματα μπορούν να προκύψουν απευθείας από το ζευγάρι γωνίας/άξονα, μέσω της Εξίσωση 15.

$$q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$q_n = r_n \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Εξίσωση 15: Μετατροπή ζευγαριού γωνίας/άξονα περιστροφής σε τετραδόνια (όπου  $\theta$ , η γωνία περιστροφής και  $r_n$ , ο  $n$  δείκτης Miller του άξονα περιστροφής) [15].

Η μετατροπή από τετραδόνια στον Πίνακα Περιστροφής, πραγματοποιείται μέσω της Εξίσωση 16.

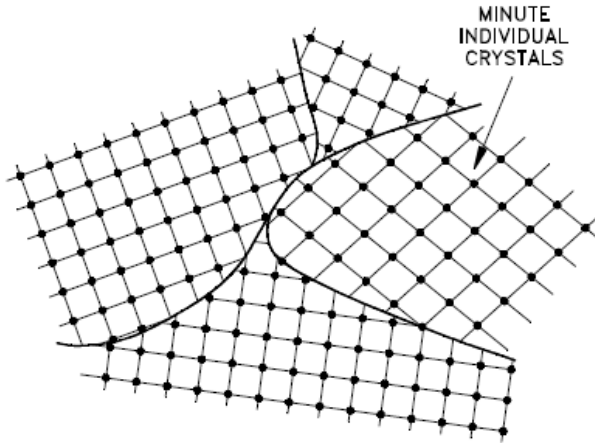
$$\Delta g = \begin{pmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1q_2 - q_0q_3) & 2(q_1q_3 + q_0q_2) \\ 2(q_1q_2 + q_0q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 & 2(q_2q_3 - q_0q_1) \\ 2(q_1q_3 - q_0q_2) & 2(q_2q_3 + q_0q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{pmatrix}$$

Εξίσωση 16: Υπολογισμός του Πίνακα Περιστροφής από τα στοιχεία του διανύσματος τετραδονίων [15].

## 2.2 Όριο κόκκου

### 2.2.1 Εισαγωγικές έννοιες

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, συζητήθηκαν οι βασικές αρχές ανάλυσης των προσανατολισμών των κόκκων ενός πολυκρυσταλλικού υλικού, ή αλλιώς «μικροϊστού» [16]. Ωστόσο, μια τέτοια ανάλυση λαμβάνει υπ' όψιν μόνο τις πληροφορίες σχετικά με τον προσανατολισμό κάθε κόκκου ξεχωριστά, αγνοώντας τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα



Εικόνα 13: Σχηματική αναπαράσταση ορίων κόκκων [44].

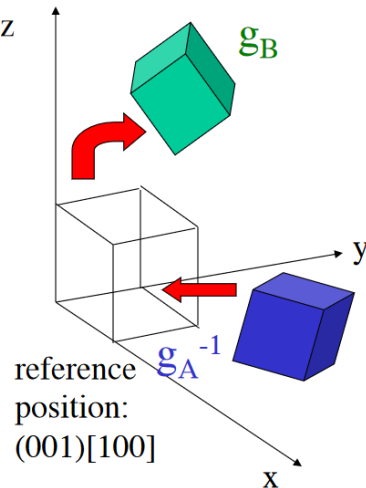
στις διεπιφάνειες μεταξύ αυτών [20]. Ένα όριο κόκκου, δημιουργείται στο στάδιο της ανάπτυξης κατά την στερεοποίηση, όταν δύο κόκκοι με δεδομένη διαφορά προσανατολισμού έρχονται σε επαφή. Οι περιοχές των ορίων είναι σχετικά λεπτού πάχους, 1-2 ατόμων, και χαρακτηρίζονται από απώλεια της αυστηρής κρυσταλλικής δομής, αυξημένη πυκνότητα διαταραχών, καθώς και μεγάλη διακύμανση μεγέθους ενδοπλεγματικών κενών [25, 26]. Εξαιτίας αυτών, αναπτύσσονται τάσεις στα άτομα ένθεν και ένθεν του ορίου, γεγονός που οδηγεί σε αύξηση της διεπιφανειακής ενέργειας σε αυτές τις

περιοχές [25, 11].

Για την πλήρη περιγραφή και μελέτη ενός ορίου, πρέπει να ληφθούν τόσο κρυσταλλογραφικές όσο και γεωμετρικές παράμετροι, οι οποίες είναι και το αντικείμενο του παρόντος κεφαλαίου.

### 2.2.2 Διαφορά Προσανατολισμού (Misorientation)

Η διαφορά προσανατολισμού (misorientation) μεταξύ δύο κόκκων, ισούται με την περιστροφή που απαιτείται να υποστεί το σύστημα αξόνων του ενός, ώστε να έρθει σε απόλυτη ταύτιση με το αντίστοιχο του άλλου, εντός του μακροσκοπικού συστήματος αξόνων, όπως φαίνεται σχηματικά στην [12, 24]. Η μαθηματική έκφραση του παραπάνω ορισμού αποτυπώνεται στην Εξίσωση 17, από την οποία προκύπτει ο Πίνακας Διαφοράς Προσανατολισμού -ΠΔΠ (Misorientation Matrix,  $\Delta g_{AB}$ ) [15, 16], Μέσω αυτού, μπορεί να εκφραστεί μαθηματικώς η βασική αρχή που απεικονίζεται στην Εικόνα 14, όπου ο κρύσταλλος κυβικής συμμετρίας A (με Πίνακα Προσανατολισμού  $g_A$ ), περιστρέφεται προς την αρχή των αξόνων του δοκιμίου (Reference Frame) και μετέπειτα, έρχεται, περιστρέφοντας και πάλι, σε ταύτιση με τον κρύσταλλο B (με πίνακα προσανατολισμού  $g_B$ ) [27].



Εικόνα 14: Σχηματική αναπαράσταση βασικής αρχής για τον υπολογισμό της Διαφοράς Προσανατολισμού (Misorientation) δύο κυβικών κρυστάλλων [17].

$$\Delta g_{AB} = g_B g_A^{-1}$$

Εξίσωση 17: Υπολογισμός Πίνακα Διαφοράς Προσανατολισμού [12, 15, 16].

Λαμβάνοντας υπ' όψιν και την κρυσταλλική συμμετρία, στον υπολογισμό των Πινάκων Προσανατολισμού  $g_A$  και  $g_B$  (Εξίσωση 4), η Εξίσωση 17 μπορεί να εκφραστεί αναλυτικότερα μέσω της Εξίσωσης 18.

$$\Delta g_{AB} = (O_{crys} g_B)(O_{crys} g_A^{-1})$$

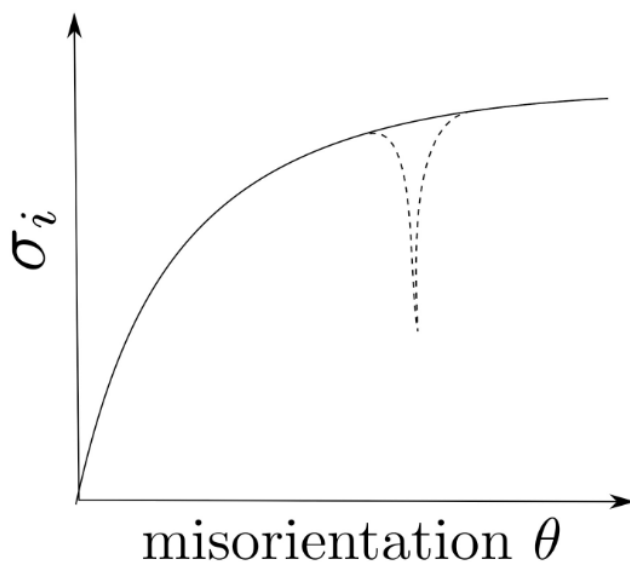
Εξίσωση 18: Υπολογισμός Πίνακα Διαφοράς Προσανατολισμού, συναρτήσει της κρυσταλλικής συμμετρίας των κρυστάλλων A και B [15, 16, 27].

Για κάθε υπολογισμό διαφοράς προσανατολισμού, προκύπτουν  $24 \times 24 \times 2 = 1152$  κρυσταλλογραφικά ισοδύναμοι ΠΔΠ, όπου 24, ο αριθμός των συνολικών Πινάκων Στοιχείων Σημειακής Συμμετρίας (Point Group Symmetry Elements) του κυβικού συστήματος. Οι λύσεις, εν συνεχεία, διπλασιάζονται καθώς δεν υπάρχει διαφορά μεταξύ της περιστροφής του κόκκου B προς τον A και του αντίστροφου [15, 16].

Ο πιο θεμελιώδης τρόπος να εκφραστεί η διαφορά προσανατολισμού μεταξύ δύο κρυστάλλων, είναι μέσω της γωνίας διαφοράς προσανατολισμού  $\theta$  (misorientation angle), η οποία αποτελεί μέρος του ζευγαριού γωνίας/άξονα (misorientation angle/axis pair), και υπολογίζεται μέσω των Εξισώσεων Εξίσωση 5, Εξίσωση 6 και Εξίσωση 7, από τον ΠΔΠ. Με βάση την  $\theta$ , τα όρια μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε δύο κατηγορίες [28].

- Όρια κόκκου χαμηλής γωνίας (Low-angle grain boundary, LAGB) για  $\theta < 10^\circ - 15^\circ$ . Πρόκειται για μικρές διαφορές προσανατολισμού μεταξύ περιοχών του ίδιου κόκκου.
- Όρια κόκκου υψηλής γωνίας (High-angle grain boundary, HAGB), για  $\theta > 10^\circ - 15^\circ$ . Πρόκειται για το διαχωριστικό σημείο πάνω από το οποίο ένθεν και ένθεν του ορίου, έχει οριστεί ότι βρίσκονται δύο ξεχωριστοί κρύσταλλοι.

Κατά γενικό κανόνα, η διεπιφανειακή ενέργεια αυξάνεται εκθετικώς με την αύξηση της γωνίας διαφοράς προσανατολισμού  $\theta$ , όπως φαίνεται στην Εικόνα 15 [12]. Ωστόσο, υπάρχουν περιπτώσεις στις οποίες αυτός ο κανόνας δεν τηρείται.



Εικόνα 15: Εξέλιξη διεπιφανειακής ενέργειας σε σχέση με την γωνία διαφοράς προσανατολισμού [12].

### 2.2.2.1 Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού (Misorientation Distribution Function, MDF)

Από την μορφή Πίνακα, μια διαφορά προσανατολισμού μπορεί να εκφραστεί, σε πρώτη φάση είτε σε γωνίες Euler, είτε ως ζευγάρι γωνία/άξονα περιστροφής. Όπως αναλύθηκε και στο Κεφάλαιο 2, από ένα ζευγάρι γωνίας/άξονα περιστροφής, μπορούν να υπολογιστούν είτε τα διανύσματα Rodriguez-Frank, του ομώνυμου χώρου, είτε οι παράμετροι  $\theta, \psi$  και  $\omega$  του



κυλινδρικού χώρου γωνίας/άξονα [15, 16]. Δεδομένα διαφορών προσανατολισμού μπορούν να αποτυπωθούν είτε σε διαγράμματα κατανομής γωνία και άξονα διαφοράς προσανατολισμού είτε σε τριδιάστατους χώρους (Euler, Rodrigues & κυλινδρικός γωνίας/άξονα)(φτιάξε σχηματικό διάγραμμα). Για πειραματικά δεδομένα διαφοράς προσανατολισμών, χρησιμοποιείται το στατιστικό εργαλείο της Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμών (Misorientation Distribution Function, MDF) ώστε να μπορέσει να καταστεί δυνατή η απεικόνιση των δεδομένων αυτών στους προαναφερθέντες τρόπους. Μια από τις αρχικές προσπάθειες να αναπτυχθεί η MDF έγινε από τους Sztwiertnia et al. [24], οι οποίοι υπολόγισαν, για δεδομένα  $\Gamma$ , την πιθανότητα μιας διαφοράς προσανατολισμού να βρίσκεται εντός συγκεκριμένου διαστήματος  $d\Gamma$ . Στην Εξίσωση 19, φαίνεται η βασική αρχή του υπολογισμού.

$$\frac{d\Gamma}{\Gamma} = f(\Gamma(\theta, r))d\Gamma(\theta, r)$$

Εξίσωση 19: Υπολογισμός Πιθανότητας μιας διαφοράς προσανατολισμού να βρίσκεται εντός συγκεκριμένου διαστήματος  $d\Gamma$

Ο όρος  $f(\Gamma(\theta, r))$  ισούται με την MDF, και μπορεί να υπολογιστεί με αρκετούς τρόπους, μερικοί εκ των οποίων φαίνονται παρακάτω.

- Ανάπτυξη σειρών γενικευμένων σφαιρικών αρμονικών συναρτήσεων, όπως αναπτύχθηκε από τον Bunge [13] για τον υπολογισμό της ODF

$$f(\Gamma(\theta, r)) = \sum_l \sum_{n,m} c_l^{mn} \ddot{T}_l^{mn}(\Gamma)$$

Εξίσωση 20: Υπολογισμός της MDF, με ανάπτυξη γενικευμένων σφαιρικών αρμονικών συναρτήσεων [13, 24].

- Με την μέθοδο των πυρήνων για την εκτίμηση συνάρτησης κατανομής πιθανότητας (Kernel Density Estimation, KDE)

$$f(\Gamma(\theta, r)) = F_H(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n K_H(x - x_i)$$

Εξίσωση 21: Υπολογισμός της MDF, με εκτίμηση της κατανομής πυκνότητας πιθανότητας με την μέθοδο του πυρήνα για πολυμεταβλητές παρατηρήσεις (Kernel Density Estimation, KDE) [29].

όπου  $n$  το πλήθος των δεδομένων,  $x$  και  $x_i$  τα δεδομένα διαφοράς προσανατολισμού, υπό την μορφή διανύσματος διαστάσεων  $d$ ,  $K$  η συνάρτηση καμπύλης πυρήνα και  $H$  το πλάτος της υπό μορφή πίνακα  $dx$  [29].

Ο όρος  $d\Gamma(\theta, r)$ , για διαφορά προσανατολισμού στον κυλινδρικό χώρο γωνίας/άξονα, δίνεται από την εξίσωση.

$$d\Gamma(\omega, r) = \frac{1}{2\pi^2} \sin^2 \frac{\omega}{2} \sin \theta d\omega d\theta d\psi$$

Εξίσωση 22: Υπολογισμός όρου  $d\Gamma(\theta, r)$  της Εξίσωση 19 [24].

- Με ολοκλήρωση της κατά  $\theta, \psi$ , και διαίρεση με  $d\omega$ , υπολογίζεται η συνάρτηση κατανομής γωνιών περιστροφής (Disorientation/Misorientation Angle Distribution Function)

$$V(\omega) = K^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega}{2}}{2\pi^2} \int_{s_0}^{s_n} f(\omega, \theta, \psi) ds$$

Εξίσωση 23: Συνάρτηση Κατανομής Πυκνότητας Πιθανότητας γωνίας διαφοράς προσανατολισμού (Disorientation/Misorientation Angle Distribution Function [24])

- Με ολοκλήρωση της κατά  $\omega$ , και διαίρεση κατά  $ds=\sin\theta d\omega d\psi$ , υπολογίζεται η συνάρτηση κατανομής αξόνων περιστροφής (Axis of rotation distribution function)

$$Q(r) = K^2 \frac{1}{2\pi^2} \int_{\omega_0}^{\omega_n} f(\omega, r) \sin^2 \frac{\omega}{2} d\omega$$

Εξίσωση 24: Συνάρτηση Κατανομής Πυκνότητας Πιθανότητας άξονα διαφοράς προσανατολισμού (Misorientation Axis Distribution Function) [24].

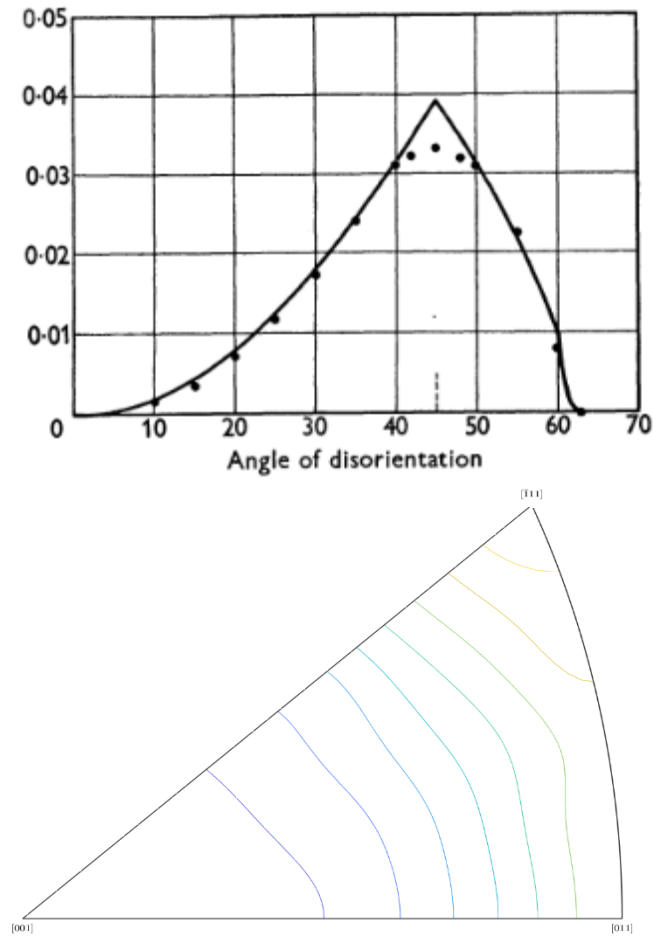
και στις δύο περιπτώσεις, το  $K^2$  αποτελεί συντελεστή κανονικοποίησης (normalization coefficient) των συναρτήσεων.

#### 2.2.2.2 Αναπαράσταση Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού

Έστω δύο κύβοι A και B, όπου ο A αποτελεί τον κύβο αναφοράς ενώ ο B μπορεί να περιστρέφεται αυθαιρέτως. Οι Mackenzie et. al [30, 31] υπολόγισαν τις κατανομές γωνιών και αξόνων περιστροφής, για την περίπτωση όπου η πιθανότητα ο B να λάβει οποιοδήποτε προσανατολισμό είναι ίδια (κάτι που συνεπάγεται με  $f(\Gamma)=1$ ). Αυτές φαίνονται στην

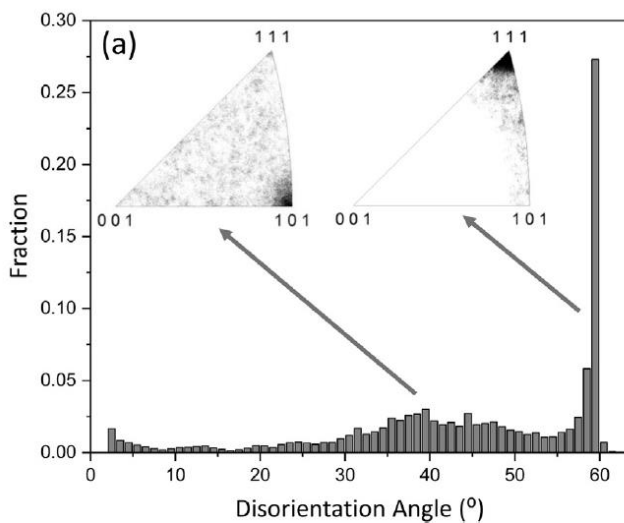
Εικόνα 16.





Εικόνα 16: Κατανομή γωνιών (πάνω) και αξόνων (κάτω) διαφοράς προσανατολισμού για  $f(\Gamma)=1$  [30, 31].

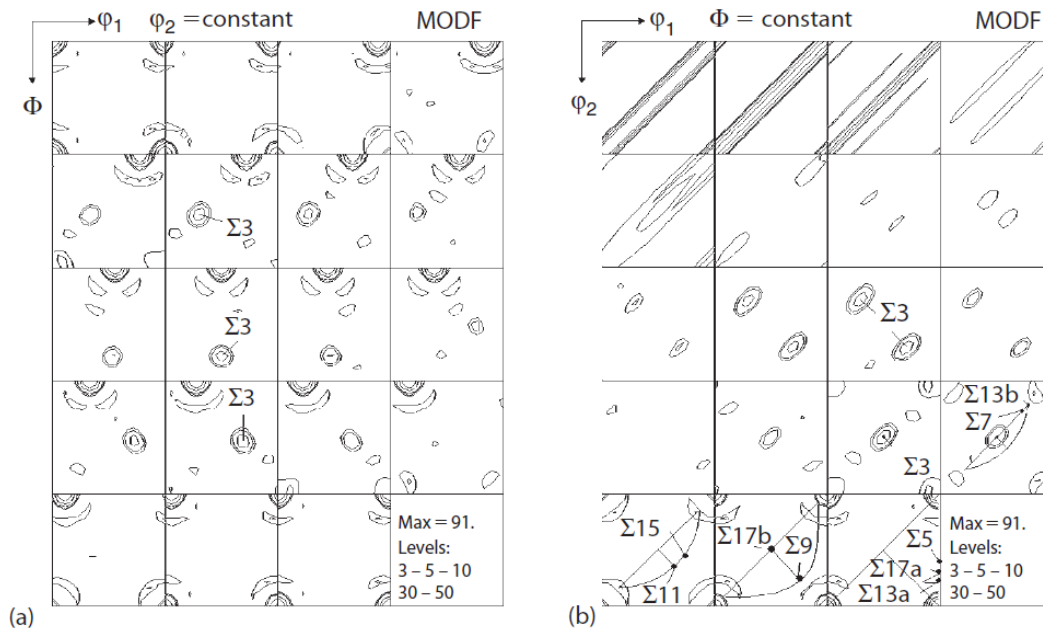
Βάσει αυτών των διαγραμμάτων μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η μέγιστη γωνία περιστροφής που μπορεί να αναπτυχθεί μεταξύ δύο κρυστάλλων του κυβικού συστήματος είναι  $62.8^\circ$  [32].



Εικόνα 17: Διάγραμμα κατανομής γωνιών διαφοράς προσανατολισμού σε χάλυβα AM 316L (as-built), με στεογραφίματα άξονων διαφοράς προσανατολισμού σε διαστήματα γωνιών [25].

Οι κατανομές αυτές, ονομάζονται ως κατανομές Mackenzie [16, 20]. Τα διαγράμματα κατανομής γωνιών και αξόνων περιστροφής (Εικόνα 16) χρησιμοποιούνται κατά κόρον στην διεθνή βιβλιογραφία, ωστόσο υπάρχει απώλεια πληροφορίας, είτε παρατεθούν και τα δύο για μια ομάδα πειραματικών δεδομένων, είτε ειδικότερα, όταν παραλείπεται κάποιο από τα δύο. Υπάρχει η δυνατότητα να εξάγονται διαγράμματα κατανομής αξόνων περιστροφής για ένα συγκεκριμένο εύρος γωνιών, παρόλα αυτά, τα παρεχόμενα αποτελέσματα δεν είναι σε ευανάγνωστη μορφή (Εικόνα 17). Για τον λόγο αυτό, πολλές φορές προτιμάται η χρήση τρισδιάστατων χώρων (Rodrigues-

Frank, Euler, κυλινδρικός χώρος γωνίας/άξονα), μέσω προβολής των κατανομών σε δισδιάστατα τμήματα αυτών. Στην Εικόνα 18, φαίνεται η MDF σε τμήματα του χώρου Euler και του κυλινδρικού χώρος γωνίας/άξονα.



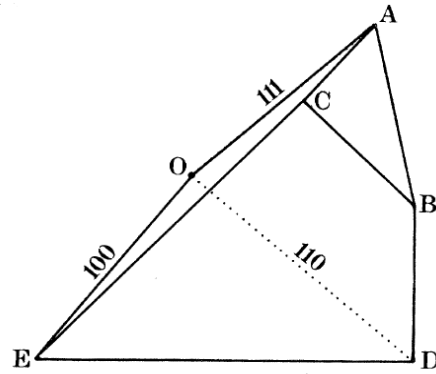
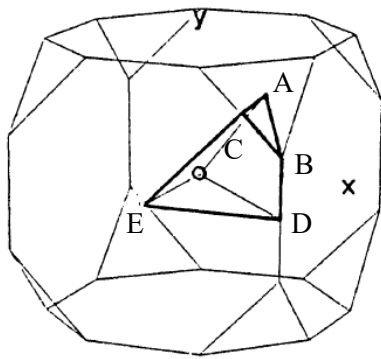
Εικόνα 18: MDF στον χώρο του Euler για κυκλικά παραμορφωμένο (cyclically deformed) δοκίμιο νικελίου a) σε τμήματα με σταθερή την  $\Phi$ , b) σε τμήματα με σταθερή την  $\Phi$  [16].

Στην κρυσταλλογραφία, ο χώρος Euler χρησιμοποιείται κατά κόρον για την αναπαράσταση του μικροϊστού. Ωστόσο, στην περίπτωση των διαφορών προσανατολισμών, ο χώρος Euler εμφανίζει σημαντικές αδυναμίες [16, 20].

- Πρώτον, η μεταβολή των γωνιών Euler δεν συνδέεται με κάποια σχέση είτε με τον άξονα είτε με την γωνία περιστροφής, καθιστώντας δύσκολη την ταυτοποίηση συγκεκριμένων ορίων κόκκων, καθώς απαιτείται η αναγραφή του πάνω στην προβολή.
- Για μικρές γωνίες  $\Phi$ , ο χώρος παρουσιάζει ασάφεια, για διαφορές προσανατολισμού με άξονα διαφοράς προσανατολισμού  $\langle 001 \rangle$ , καθώς η τριπλέτα γωνιών περιγράφει σε αυτή την περίπτωση, περιστροφές κατά  $\phi_1$  και  $\phi_2$ , οι οποίοι βάσει ορισμού, αφορούν περιστροφές στους άξονες  $Z$  και  $Z'$  αντίστοιχα. Για μικρές τιμές  $\Phi$ , ισχύει  $Z \approx Z'$ , άρα έχουμε περιστροφή σε κοινό άξονα. Αυτό φαίνεται στα τμήματα με μικρή τιμή  $\Phi$  στην Εικόνα 18b. Οι περιοχές έντονης εμφάνισης, αφορούν την ίδια διαφορά προσανατολισμού, και συγκεκριμένα, αυτές οι περιοχές εμφανίζονται για  $\phi_1 + \phi_2 = \theta$ .

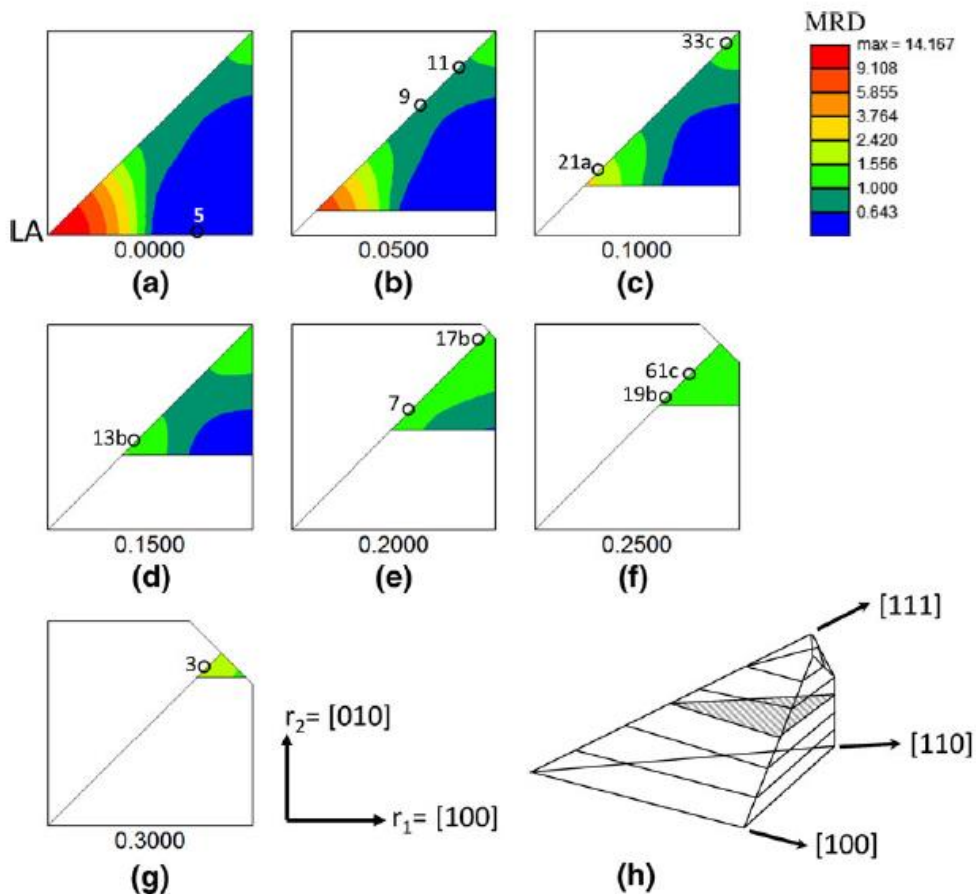
Παρόμοια προβλήματα ασάφειας εμφανίζονται και για μικρές γωνίες  $\theta$  στον κυλινδρικό χώρο γωνίας/άξονα [16].

Για τους λόγους αυτούς, είναι πλέον συνήθης, η τρισδιάστατη ανάλυση των διαφορών προσανατολισμού να γίνεται στην Θεμελιώδη Ζώνη του χώρου Rodriguez-Frank, και συγκεκριμένα στο 1/48 αυτής (Εικόνα 10), καθώς όπως φαίνεται στην, οι διαφορές προσανατολισμού στις οποίες ο άξονας περιστροφής είναι εκφρασμένος στην μορφή  $r_1 \geq r_2 \geq r_3 \geq 0$ , εμφανίζονται όλες στο κελί Mackenzie, του οποίου η βάση βρίσκεται στο επίπεδο  $r_3 = 0$ , και η μια του έδρα στο  $r_1 = 0.4142$ .



Εικόνα 19: Κελί Mackenzie που χρησιμοποιείται για την προβολή κατανομών διαφορών προσανατολισμού: εντός της Θεμελιώδους Ζώνης του χώρου Rodriguez-Frank (αριστερά), ανεξάρτητη προβολή, πάνω στην οποία σημειώνονται και οι άξονες διαφοράς προσανατολισμού που περικλύουν το κελί (δεξιά).

Η προβολή της MDF στο χώρο Rodriguez-Frank, πραγματοποιείται με δισδιάστατες τομές του κελιού MacKenzie κατά τον άξονα  $r_3$ , όπως φαίνεται στην Εικόνα 20.

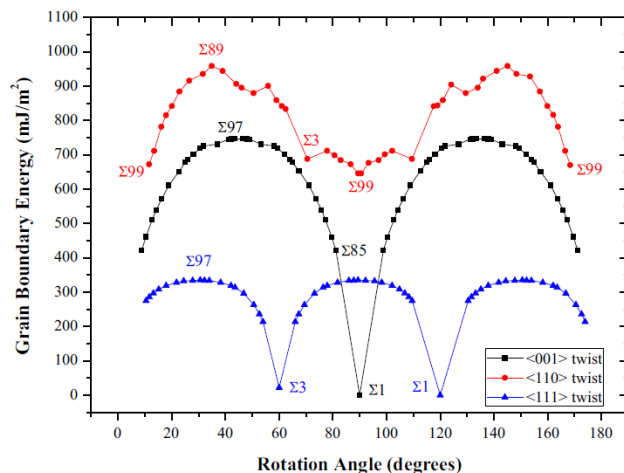


Εικόνα 20: Κατανομή διαφορών προσανατολισμού του τρισδιάστατου κελιού Mackenzie της Θεμελιώδους Ζώνης του χώρου Rodriguez-Frank για ψυχρά ελασμένο και θερμικά κατεργασμένο χάλυβα IF. Οι αριθμοί κάτω από τα τμήματα δηλώνουν την τιμή του  $r_3$  το οποίο παραμένει σταθερό σε κάθε τμήμα [33].

### 2.2.2.3 Πλέγμα Ταυτόσημων Θέσεων (Coincidence Site Lattice)

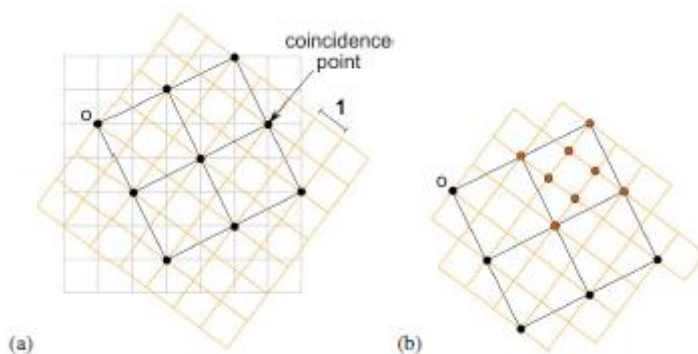
Στην Εικόνα 15, φαίνεται, για συγκεκριμένες γωνίες διαφοράς προσανατολισμού  $\theta$ , να υπάρχει μια μείωση στην διεπιφανειακή ενέργεια, υποδηλώνοντας την ύπαρξη συγκεκριμένων ορίων στα οποία λαμβάνει χώρα το συγκεκριμένο φαινόμενο. Πράγματι, αυτά τα όρια υφίστανται,

κάτι που φαίνεται στην Εικόνα 21, που δείχνει μια πραγματική κατανομή διεπιφανειακών ενεργειών σε σχέση με την γωνία διαφοράς προσανατολισμού.



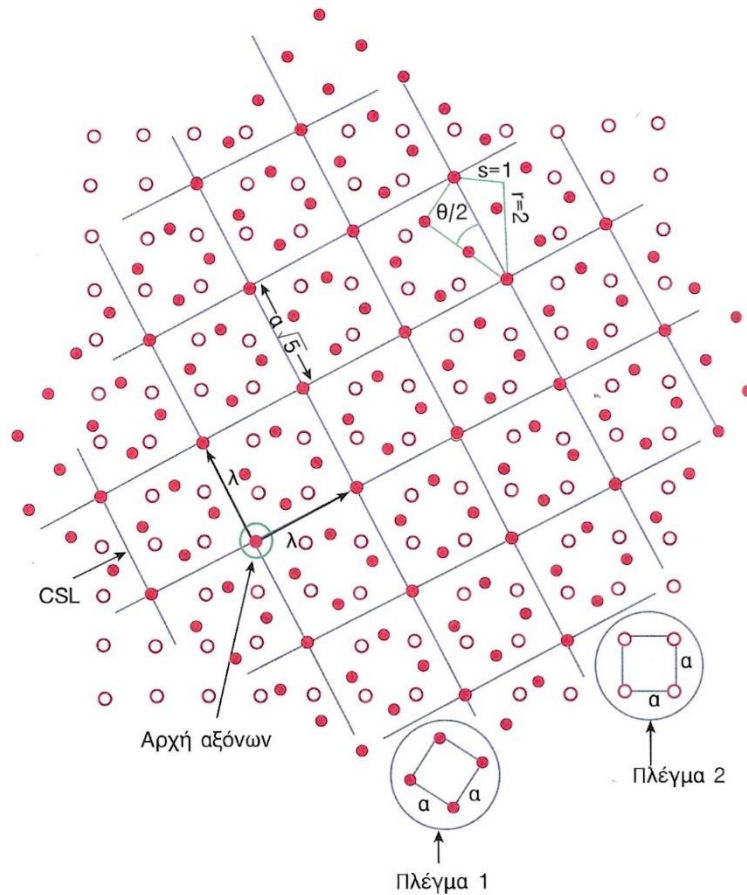
Εικόνα 21: Κατανομή διεπιφανειακής ενέργειας συναρτήσει της γωνίας διαφοράς προσανατολισμού σε χαλκό [45].

Ένας τρόπος περιγραφής και ταυτοποίησης των ορίων κόκκων είναι μέσω του μοντέλου πλέγματος ταυτόσημων θέσεων (Coincidence Site Lattice, CSL) [28]. Βασίζεται στην παραδοχή ότι ο ένας κόκκος «επεκτείνεται» πέραν το ορίου, εντός του άλλου [34]. Έτσι λοιπόν, προκύπτουν πλεγματικές θέσεις των δύο κόκκων, του ενός και του «επεκτεινόμενου» οι οποίες ταυτίζονται.



Εικόνα 22: Περιστροφή του κίτρινου πλέγματος κατά  $36.9^\circ <100>$  σε σχέση με το άσπρο πλέγμα. Με μαύρο, σημειώνονται οι πλεγματικές θέσεις οι οποίες βρίσκονται σε ταύτιση μετά την περιστροφή, ενώ με κόκκινο (b), όσες δεν βρίσκονται σε ταύτιση [12].

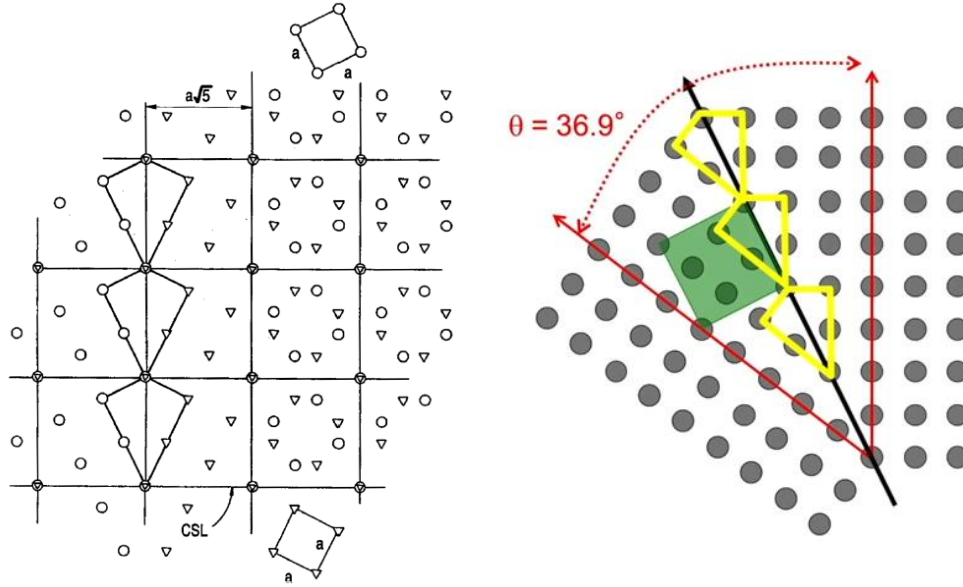
Οι ταυτιζόμενες θέσεις αυτές μεταξύ τους δημιουργούν την κυψελίδα CSL (CSL Lattice), όπως φαίνεται και στην Εικόνα 22, όπου 4 σημεία ταύτισης δημιουργούν το συγκεκριμένο πλέγμα. Η κατηγοριοποίηση πραγματοποιείται με βάση την τιμή Σ, η οποία ισούται με το πηλίκο του εμβαδού της κυψελίδας CSL, προς το αντίστοιχο της μοναδιαίας [34].



Εικόνα 23: Πλήρης ανάλυση περιστροφής δύο πλεγμάτων με το μοντέλο του πλέγματος ταυτόσημων πλεγματικών θέσεων (CSL) για όριο Σ5 [28].

Στην πραγματικότητα, μόνο τα άτομα τα οποία βρίσκονται στα όρια, είναι κοινά και στους δύο κόκκους [28]. Τα περισσότερα όρια κόκκου βρίσκονται στην διεύθυνση με την μεγαλύτερη πυκνότητα ταυτόσημων θέσεων (Coincidence Sites) [34]. Ένα πραγματικό όριο θα έχει την μορφή της Εικόνα 24, το οποίο είναι της μορφής Σ5. Παρατηρείται η ύπαρξη μιας περιοδικότητας στην περιοχή του ορίου, στην οποία οφείλεται και η μειωμένη διεπιφανειακή ενέργεια [34].





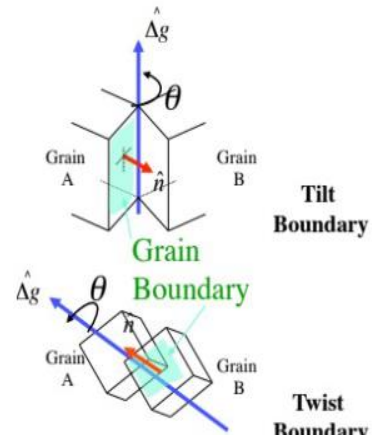
Εικόνα 24: Ανάλυση ορίου Σ5 (αριστερά) και σχηματική αναπαράσταση τελικής μορφής ορίου (δεξιά) [46].

Στο Παράρτημα, δίνονται τα δεδομένα διαφοράς προσανατολισμού για κάθε όριο, που περιγράφεται μέσω του συγκεκριμένου μοντέλου και παρουσιάζει ερευνητικό ενδιαφέρον.

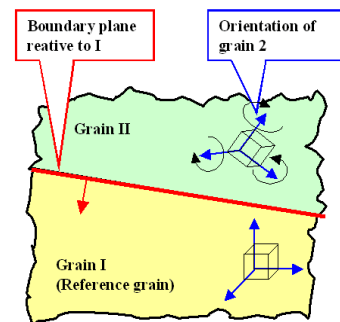
### 2.2.3 Επίπεδο Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Plane)

Εκτός των παραμέτρων που αφορούν τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό δύο κόκκων οι οποίοι τέμνονται σε ένα όριο, εξίσου σημαντικός παράγοντας αποτελεί και το επίπεδο του ορίου (grain boundary plane), το οποίο εκφράζεται σε δείκτες Miller τόσο στο σύστημα συντεταγμένων του ενός κόκκου, όσο και στο άλλου [35]. Με γνώμονα αυτό, στην Εικόνα 25 διακρίνονται δύο ειδών όρια. Στην πρώτη περίπτωση, εμφανίζεται ένα επικλινές όριο (tilt boundary) στο οποίο ο άξονας περιστροφής βρίσκεται σε παραλληλία με τον επίπεδο του ορίου, ενώ κατά μήκος του ορίου, σχηματίζονται διαταραχές ακμής (edge dislocations) [28, 36]. Αντίθετα, σε ένα όριο στροφής (twist boundary), ο άξονας περιστροφής, είναι κάθετος στο επίπεδο του ορίου, με διαταραχές κοχλίας (screw dislocations) κατά μήκος του [15, 25, 28]. Θεωρώντας υπαρκτή την πιθανότητα ο άξονας περιστροφής να αποτελεί ταυτόχρονα και συμμετρία του κρυστάλλου, μπορεί να πραγματοποιηθεί περαιτέρω κατηγοριοποίηση των ορίων αυτών σε [16]:

- Συμμετρικό επικλινές όριο (Symmetrical tilt boundary, STGB), με  $[h_1k_1l_1]=[h_2k_2l_2]$  και  $\Phi=0$
- Μη-Συμμετρικό επικλινές όριο (Asymmetrical tilt boundary, ATGB), με  $[h_1k_1l_1]\neq[h_2k_2l_2]$  και  $\Phi=0$
- Συμμετρικό όριο στροφής (Symmetrical twist boundary, TWGB), με  $[h_1k_1l_1]=[h_2k_2l_2]$  και  $\Phi\neq 0$
- Μη-Συμμετρικό όριο στροφής ή τυχαίο όριο (Asymmetrical twist boundary or random boundary), με  $[h_1k_1l_1]\neq[h_2k_2l_2]$  και  $\Phi\neq 0$



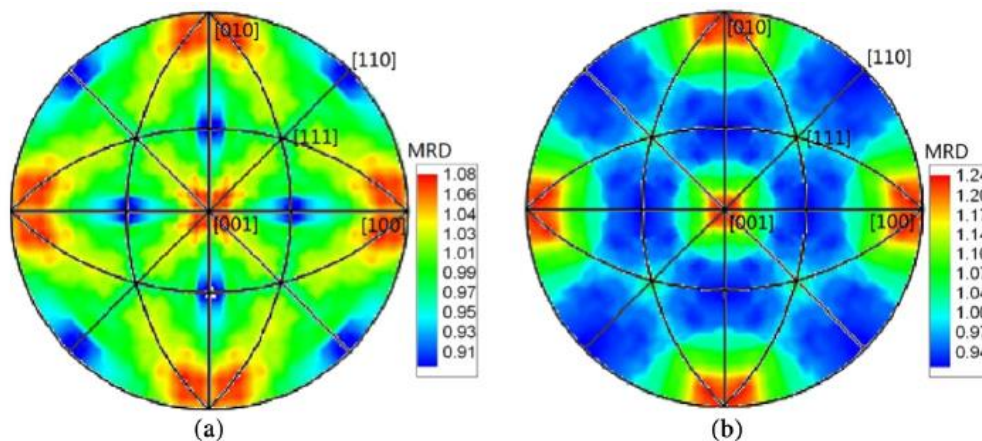
Εικόνα 25: Σχηματική αναπαράσταση επικλινούς ορίου (tilt boundary, πάνω) και ορίου στροφής twist boundary, (κάτω)



Εικόνα 26: Σχηματική αναπαράσταση ενός ορίου κόκκου, με σημειωμένο το

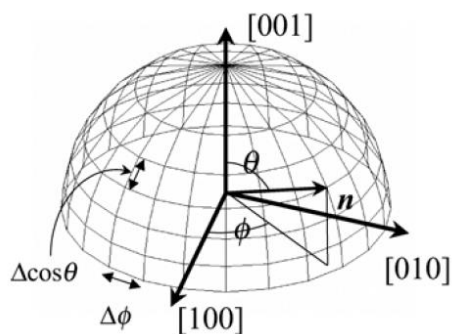
όπου  $[h_1k_1l_1]$  και  $[h_2k_2l_2]$ , οι δείκτες Miller του επιπέδου του ορίου, εκφρασμένοι στα συστήματα συντεταγμένων των δύο κόκκων αντίστοιχα, και  $\Phi$  η γωνία που σχηματίζεται μεταξύ οικογενειών επιπέδων με κοινούς δείκτες Miller στους δύο κόκκους [16].

Στην διεθνή βιβλιογραφία, τα επίπεδα των ορίων πειραματικών δεδομένων αναλύονται μέσω των σφαιρικών συντεταγμένων της διεύθυνσης η οποία βρίσκεται κάθετα στο επίπεδο (Εικόνα 28), και επακόλουθη στερεογραφική προβολή στο δίκτυο Wulff [37].

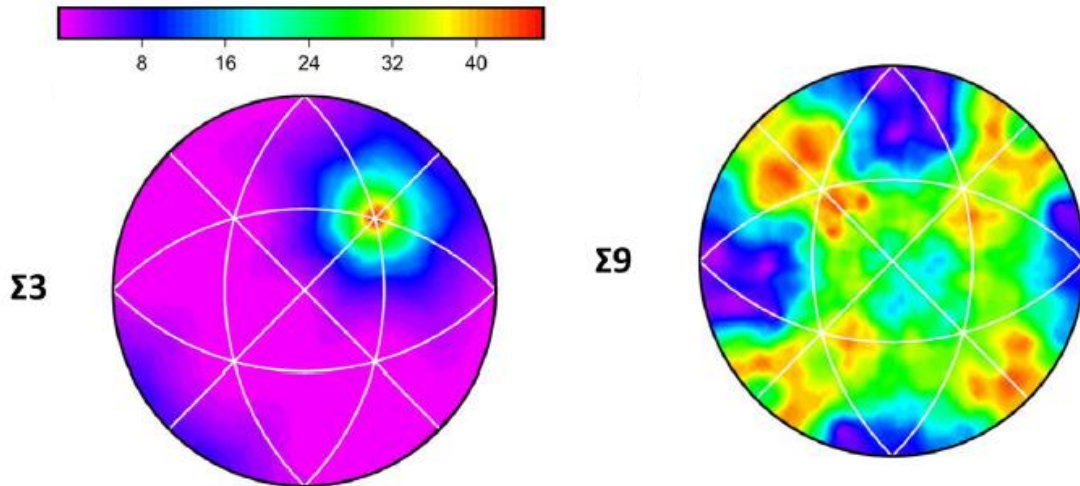


Εικόνα 27: Κατανομές επιπέδων ορίων κόκκων σε στερεογραφική προβολή πόλου (001) για ψυχρά ελασμένο υψηλής καθαρότητας σίδηρομε ποσοστό ελάτωσης πάχους 87 μετά από θερμική κατεργασία στους 620 οC για α) 15 min β) 45 min [37].

Συνεπώς, για την πλήρη περιγραφή μιας διεπιφάνειας μεταξύ δύο κόκκων απαιτούνται 5 παράμετροι, από τις οποίες οι 3 αφορούν την διαφορά προσανατολισμού των δύο κόκκων (εκφρασμένη σε τρισδιάστατους χώρους) και 2, το επίπεδο του ορίου [38]. Αυτές οι παράμετροι ονομάζονται και ως Χαρακτήρας του Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Character), ενώ η κατανομή αυτού σε όρια κόκκου πειραματικών δεδομένων, ως Κατανομή Χαρακτήρα Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Character Distribution) [35, 38, 39]. Μια τέτοια ανάλυση φαίνεται στην Εικόνα 29, για δεδομένα διαφοράς προσανατολισμού που φαίνονται στην Εικόνα 17. Από τα δεδομένα διαφοράς προσανατολισμού, χρησιμοποιούνται οι διαφορές ενδιαφέροντος (συνήθως οι πολυπληθέστερες), και στην συνέχεια εξάγονται στενογραφήματα κατανομής επιπέδων των συγκεκριμένων ορίων μέσα στην μικροδομή.



Εικόνα 28: Υπολογισμός σφαιρικών συντεταγμένων διεύθυνσης κάθετης στο επίπεδο του ορίου κόκκου [29].

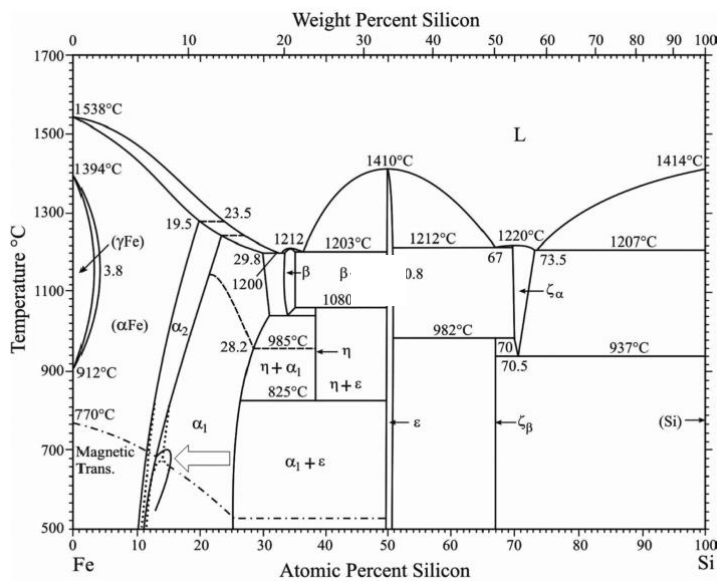


Εικόνα 29: Ανάλυση Κατανομής Χαρακτήρα Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Character Distribution) για χάλυβα AM 316L (as-built) για διαφορές προσανατολισμού  $60^\circ/[111]$  ( $\Sigma 3$ ) και  $38.9^\circ/[110]$  [ $\Sigma 9$ ].

### 2.3 Ηλεκτρικοί Χάλυβες

Ως ηλεκτρικοί χάλυβες (ή ηλεκτροχάλυβες) καλούνται οι χάλυβες με κύρια κραματική προσθήκη το πυρίτιο (-Si), η οποία είναι και υπεύθυνη για την απόδοση ενισχυμένων ηλεκτρομαγνητικών ιδιοτήτων στο υλικό (ψάξε καμία τιμή) [40]. Άλλα κραματικά στοιχεία που συναντώνται στους χάλυβες αυτού του τύπου είναι C, Mn, και Al, ως κατάλοιπα

της εξαγωγικής μεταλλουργίας [40]. Οι ιδιότητες τους εξαρτώνται κατά βάση από τον κρυσταλλογραφικό ιστό (texture-sensitive material) καθώς και από την περιεκτικότητά τους σε Si, το μέγεθος κόκκου και από την περιεκτικότητά σε ακαθαρσίες [41, 42, 43]. Διακρίνονται σε δύο κύριες κατηγορίες [40]:

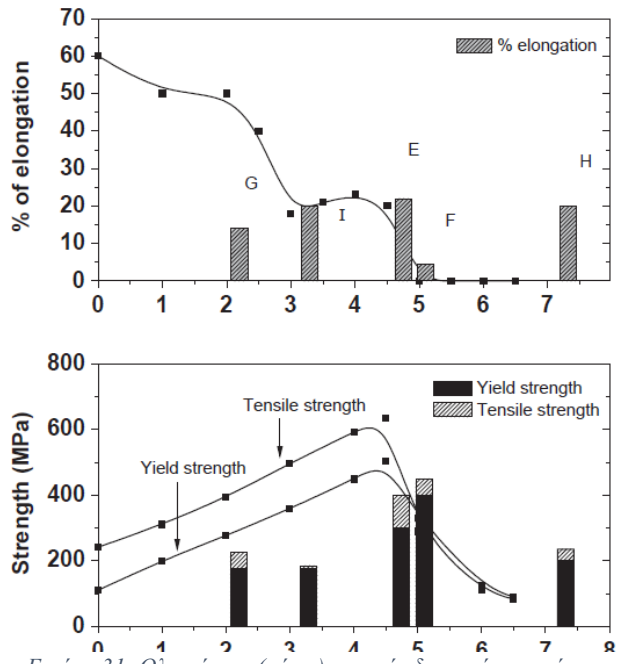


Εικόνα 30: Διάγραμμα φάσεων ισορροπίας συστήματος Fe-Si [42].



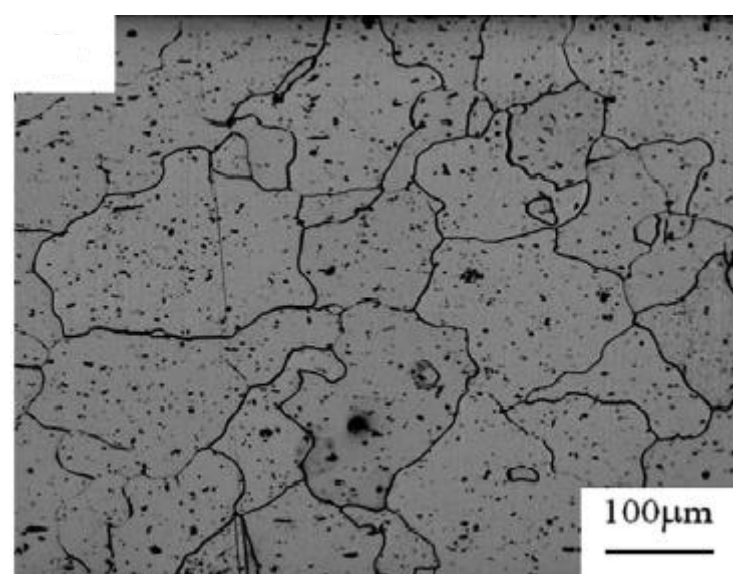
- Grain Oriented (G.O.): Οι μαγνητικές ιδιότητες βελτιστοποιούνται κατά δεδομένη διεύθυνση (συνήθως της RD). Χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές όπου η μαγνητική ροή (magnetic flux) είναι σταθερή, όπως σε πυρήνες μετασχηματιστών.
- Non-Grain Orientated (N.G.O.): Οι μαγνητικές ιδιότητες είναι ισότροπες. Είναι φθηνότεροι από τους G.O. και χρησιμοποιούνται σε περιπτώσεις όπου η μαγνητική ροή δεν είναι σταθερή, δηλαδή, σε περιστρεφόμενα μέρη κάποιας διάταξης όπως σε ηλεκτροκινητήρες ή γεννήτριες

Η κατά βάρος περιεκτικότητα του Si σπανίως ξεπερνά το 4%, καθώς από αυτό το σημείο και μετά, οι μηχανικές ιδιότητες ταπεινώνονται σημαντικά, με κυριότερη την ολκιμότητα, κάτι που έχει άμεση συνέπεια στην ψυχρή έλαση του υλικού [44, 45]. Τα υπόλοιπα στοιχεία, πρέπει εξίσου να παραμένουν σε χαμηλά επίπεδα περιεκτικότητας, ιδιαίτερα αυτά που είναι επιρρεπή σε δημιουργία ενώσεων (καρβίδια, νιτρίδια, σουλφίδια) καθώς η ύπαρξη αυτών στην μικροδομή του υλικού οδηγούν σε διατάραξη του μαγνητικού πεδίου κατά την λειτουργία [46].

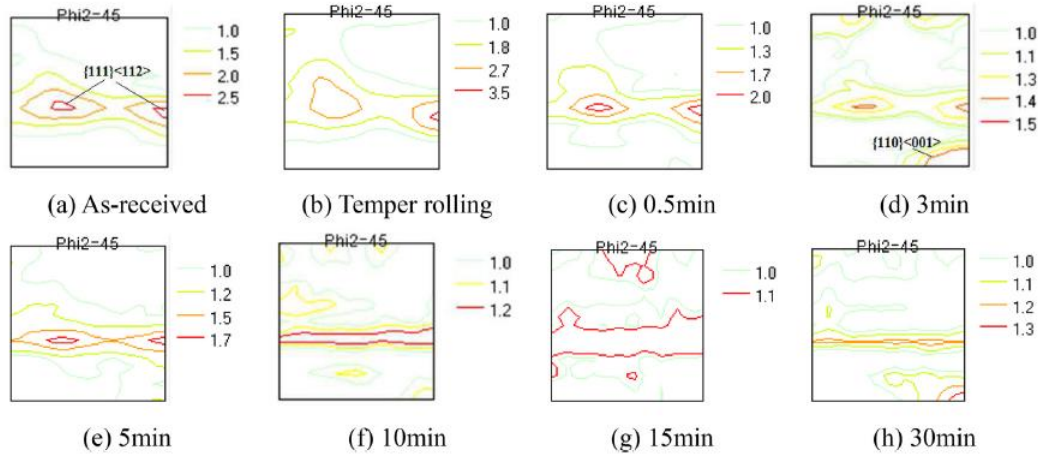


Εικόνα 31: Ολκιμότητα (πάνω), σημείο διαρροής και μέγιστη εφελκυστική αντοχή (κάτω) συναρτήσει του wt. % Si και Al [34].

Στην Εικόνα 32 φαίνεται η μικροδομή ενός τέτοιου τύπου ηλεκτροχάλυβα. Παρατηρείται μια ομοιογενή φερριτική μικροδομή με ισαξονικούς ευμεγέθεις κόκκους, οι οποίοι επιδρούν θετικά στις μαγνητικές ιδιότητες του υλικού. Ένα εύρος της τάξεως των 80-150 μm θεωρείται ικανοποιητικό στο τελικό προϊόν [41]. Η πιο σημαντική παράμετρος στα υλικά αυτά παρόλα αυτά αποτελεί ο έλεγχος του κρυσταλλογραφικού ιστού. Συνήθεις προσανατολισμοί που



Εικόνα 32: Μικρογραφία Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (S.E.M.) ανακρυσταλλωμένου ηλεκτρικού χάλυβα [31].



Εικόνα 33: Εξέλιξη Συνάρτησης Κατανομής Προσανατολισμών κατά τα στάδια μεταποίησης (*As - received*= Φύλλο ψυχρής έλασης, (c)-(d): χρόνοι τελικής θερμικής κατεργασίας) [42].

συναντώνται κατά την ψυχρή έλαση BCC μετάλλων όπως η  $\alpha$ -fibre και η  $\gamma$ -fibre [14, 17, 47], στην περίπτωση των ηλεκτρικών χαλύβων, είναι ανεπιθύμητοι στο τελικό προϊόν, καθώς ταπεινώνουν τις στοχευμένες ιδιότητες. Αντί αυτών, ο κρυσταλλογραφικός ιστός του υλικού μετά το πέρας της μεταποίησης πρέπει να αποτελείται από προσανατολισμούς της  $\lambda$ -fibre ( $\langle 001 \rangle // ND$ ) και  $\theta$ -fibre ( $\langle 100 \rangle // ND$ ), κρυσταλλογραφικά συστατικά Goss ( $[011] \langle 100 \rangle$ ), Cube ( $[100] \langle 001 \rangle$ ) και Rotated Cube ( $[100] \langle 011 \rangle$ ) [41, 42, 48]

### 3. Υπολογιστικό Μέρος

#### 3.1 Λογισμικό DRAGen

Το DRAGen, το οποίο χρησιμοποιήθηκε στην συγκεκριμένη Διπλωματική Εργασία., αποτελεί λογισμικό δημιουργίας sRVE και αναπτύχθηκε από το Department of Integrity of Materials and Structures (IMS), του Ινστιτούτου Χάλυβα (IEHK) του RWTH Aachen. Χρησιμοποιεί διακριτές μεθόδους για την δημιουργία των sRVEs. Επιγραμματικά αυτές είναι [4]:

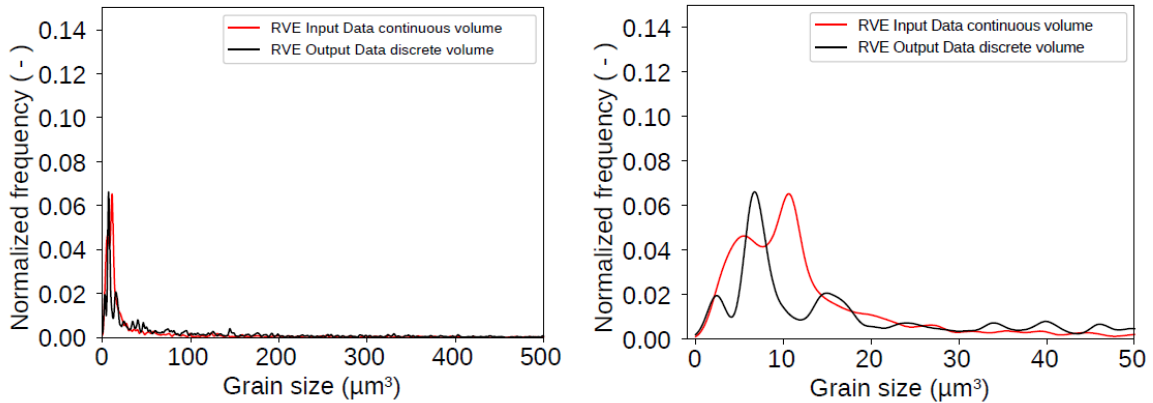
1. Δημιουργία αρχείου δεδομένων εισόδου.
2. Τοποθέτηση ελλειψοειδών κόκκων εντός τρισδιάστατου χώρου μέσω αλγορίθμου RSA.
3. Πλήρωση των κενών που προκύπτουν μεταξύ των ελλειψοειδών κόκκων (Discrete Tesselation).

Τα γεωμετρικά και κρυσταλλογραφικά δεδομένα τροφοδοτούνται ως αρχείο μορφής .csv, και εξάγονται από την εργαλειοθήκη (toolbox) MTEX, του λογισμικού MATLAB 2023b. Η μορφή που πρέπει να έχει το αρχείο, φαίνεται στον Πίνακα 3.

Πίνακας 3: Ταξινόμηση δεδομένων σε μορφή αρχείου .csv για χρήση στο λογισμικό δημιουργίας sRVE DRAGen

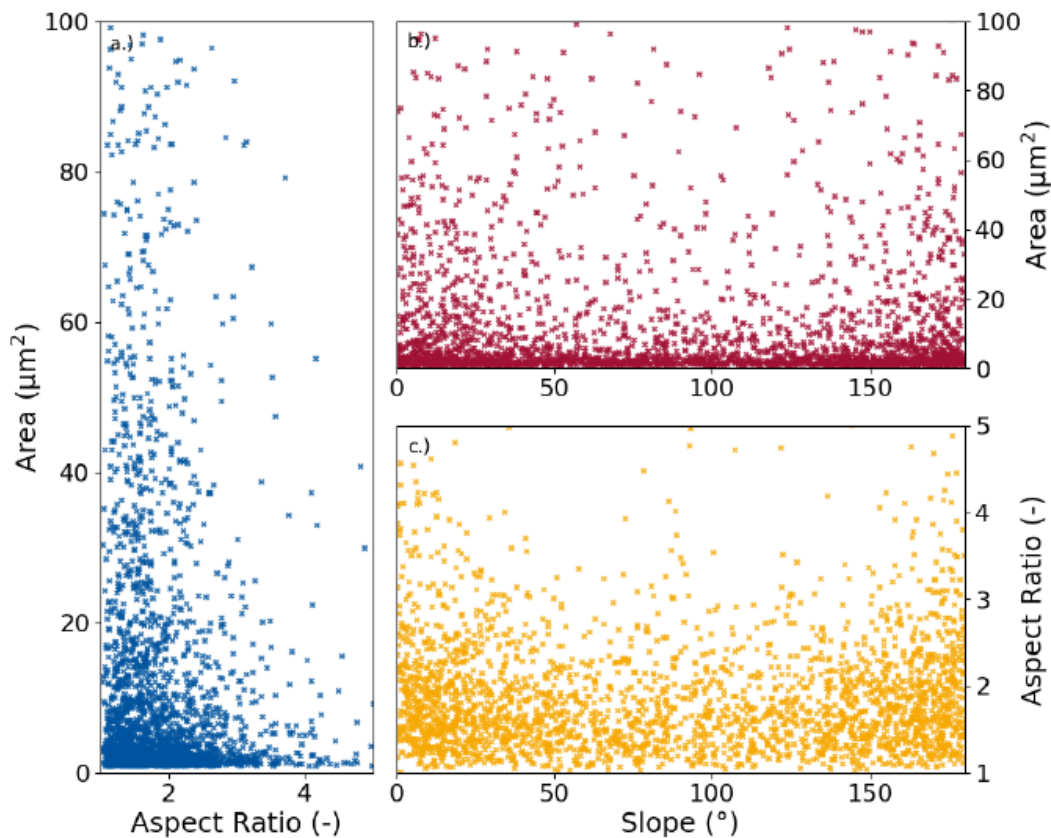
Δεδομένα Γεωμετρίας				Προσανατολισμός		
a	b	c	alpha (Slope)	phi1 ( $\phi_1$ )	PHI ( $\Phi$ )	phi2 ( $\phi_2$ )

Την δομική μονάδα του RVE αποτελεί ο κόκκος, ο οποίος επιλέγεται να είναι ελλειψοειδούς σχήματος. Η δημιουργία του RVE εκκινεί με την τοποθέτηση των κόκκων σε τυχαίες θέσεις εντός του τρισδιάστατου όγκου, σε ποσοστό του αρχικού τους μεγέθους, καθώς δεν μπορεί να επιτευχθεί 100% πλήρωση όγκου με τέλεια ελλειψοειδή. Στο επόμενο στάδιο, οι κόκκοι αυξάνουν κλιμακωτά σε μέγεθος, έως ότου έρθουν σε επαφή με κάποιον άλλο κόκκο, ή φτάσουν στο 100% του μεγέθους τους, εξάγοντας έτσι το τελικό RVE, του οποίου τα στατιστικά μεγέθη συμβαδίζουν με αυτά της μικροδομής του δοκιμίου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 34, για την περίπτωση κατανομής όγκου κόκκων.



Εικόνα 34: Συγκριτικά διαγράμματα κατανομής όγκου κόκκου μεταξύ πειραματικών και δεδομένων RVE [39].

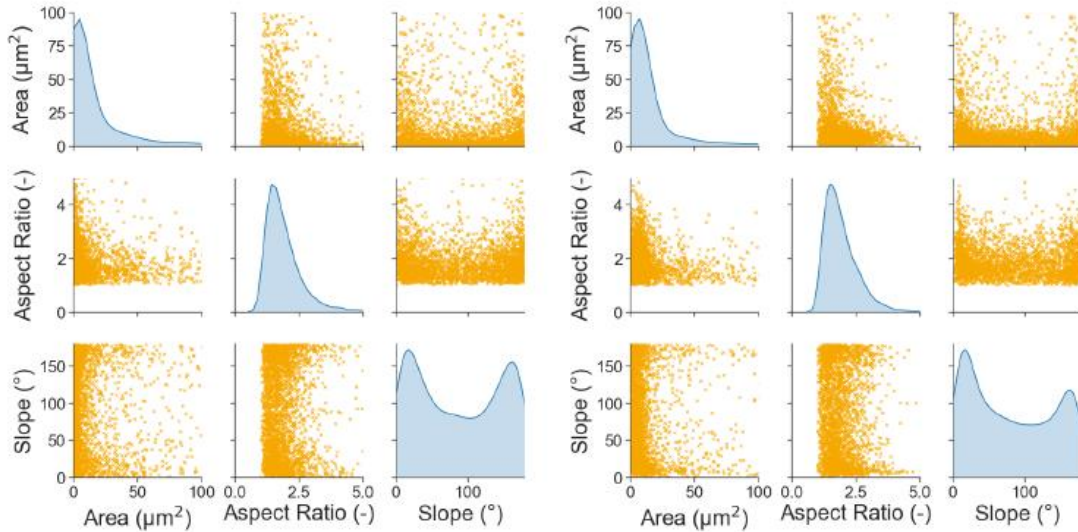
Το λογισμικό παρέχει επίσης την δυνατότητα σύνθεσης δεδομένων εισόδου, μέσω του αλγορίθμου μηχανικής εκμάθησης Wasserstein GAN. Η χρήση μηχανικής εκμάθησης και νευρωνικών δικτύων αποδίδεται στην συσχέτιση που παρουσιάζουν τα δεδομένα εισόδου μεταξύ τους, σε μια μικροδομή.



Εικόνα 35: Διαγράμματα συσχέτισης μεταξύ των δεδομένων εισόδου [49].

Παρατηρείται, ότι στην συγκεκριμένη μικροδομή, οι περισσότεροι κόκκοι έχουν εμβαδόν <20  $\mu\text{m}^2$ , και αναλογία μεγέθους (Aspect Ratio) < 2, όμως η πιθανότητα ένας μικρότερος κόκκος να έχει μεγαλύτερη αναλογία μεγέθους είναι μεγαλύτερη από κάποιον μεγαλύτερου μεγέθους κόκκο. Επιπροσθέτως, συσχέτιση εντοπίζεται και μεταξύ της κλίσεως και της αναλογίας

μεγέθους, με τους περισσότερους κόκκους να σχηματίζουν κλίση  $0^\circ$  ή  $180^\circ$  με την διεύθυνση της έλασης RD. Στην περίπτωση που δεν είχε εφαρμοστεί αυτός ο αλγόριθμος, και λαμβάνονταν υπ' όψιν ξεχωριστά οι κατανομές πιθανότητας κάθε δεδομένου εισόδου, θα μπορούσε να συντεθούν δεδομένα για κόκκους πχ.  $50 \mu\text{m}^2$ , αναλογία μεγέθους  $> 5$  και κλίση  $90^\circ$ , οι οποίοι όμως, δεν ανταποκρίνονται με την πραγματικότητα της μικροδομής [49].

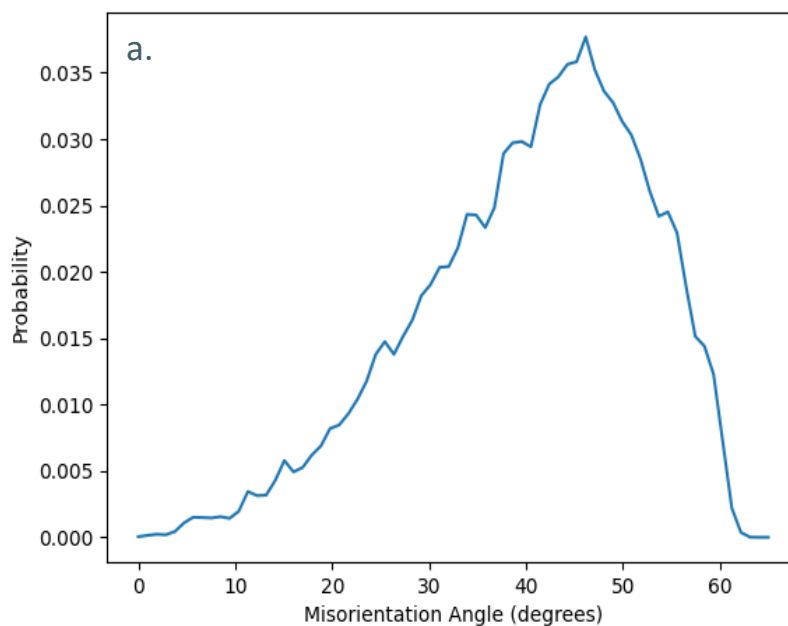


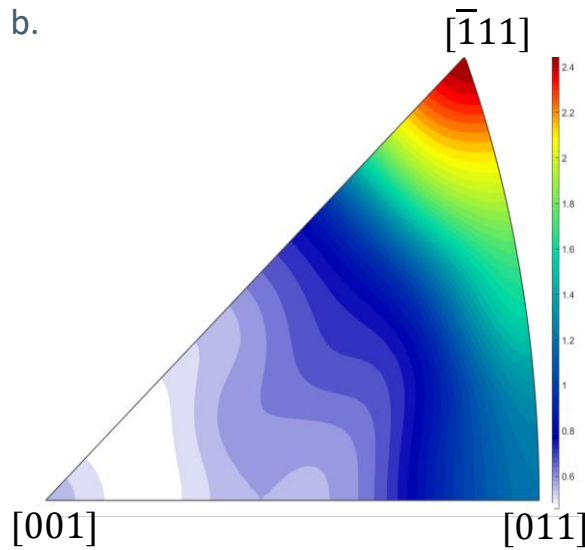
Εικόνα 36: Συσχετίσεις πειραματικών (δεξιά) και εξαγμένων δεδομένων από τον αλγόριθμο WGAN (αριστερά) [49].

### 3.2 Βελτιστοποίηση Δεδομένων Διαφοράς Προσανατολισμού στο Λογισμικό DRAGen

Ο σχεδιασμός του υπολογιστικού πειράματος έχει ως σκοπό την δημιουργία μιας μεθοδολογίας, η οποία σκοπό θα έχει να ληφθούν υπ' όψιν από το λογισμικό DRAGen, παράμετροι Διαφοράς Προσανατολισμού κατά την εξαγωγή sRVE.

Χωρίς καμία παρέμβαση από τον χρήστη, οι κατανομές γωνίας και άξονα διαφοράς προσανατολισμού φαίνονται στην Διάγραμμα 2.





Διάγραμμα 2: Κατανομές Γωνίας (α.) και Άξονα (β.) Διαφοράς Προσανατολισμού σε RVE, χωρίς παρεβάσεις βελτιστοποίησης, ανεξαρτήτως πειραματικών δεδομένων.

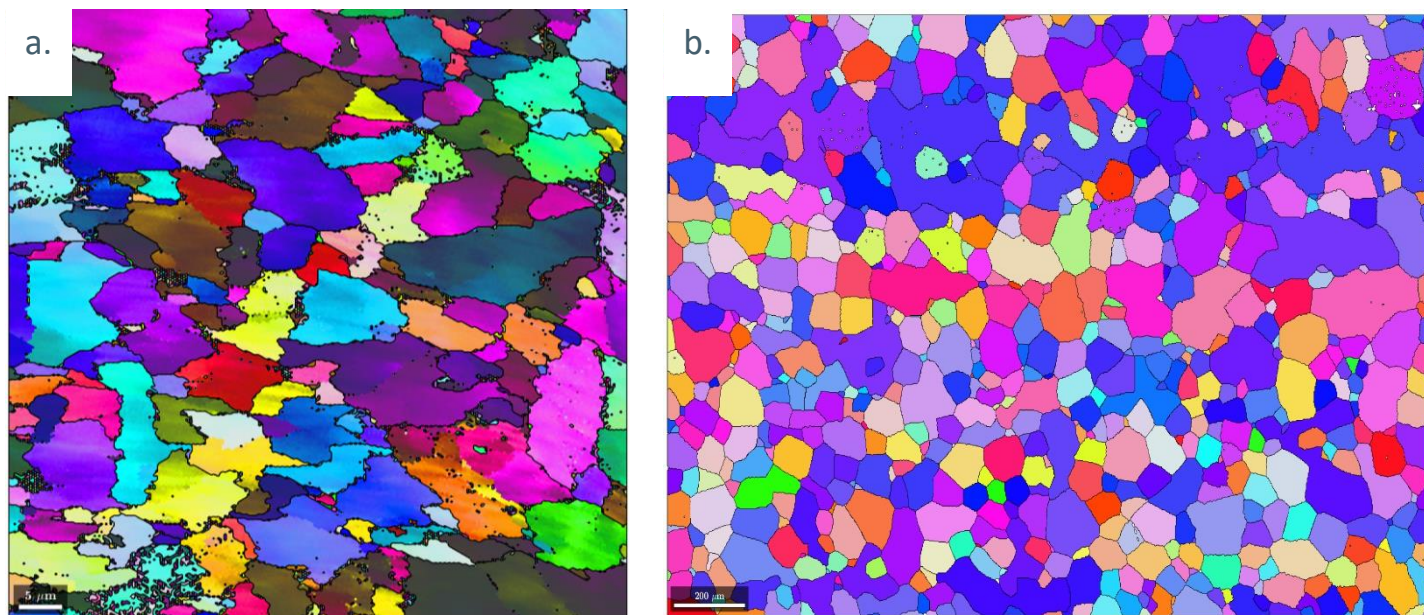
Όπως φαίνεται, οι κατανομές ακολουθούν αυτές του Mackenzie (όπως αναλύθηκε στην παράγραφο) 2.2.2.1, εξαιτίας της τυχαίας επιλογής κόκκων από τα δεδομένα εισόδου κατά το στάδιο ελλειψοειδών κόκκων. Με το στάδιο της πλήρωσης των κενών, με κλιμακωτή αύξηση του μεγέθους, υπάρχει ίση πιθανότητα του κόκκου που θα γειτνιαίνει να λάβει οποιοδήποτε προσανατολισμό που προβλέπεται από την ODF ( $f(\Gamma)=1$ ). Εκεί οφείλεται και η ύπαρξη γωνιών διαφοράς προσανατολισμού  $<15^\circ$  που εμφανίζεται στην συγκεκριμένη κατανομή, παρά το γεγονός ότι οι μετρήσεις γωνιών γίνονται μεταξύ ξεχωριστών κόκκων.

Οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν, εξετάστηκαν σε δεδομένα δύο υλικών, ενός φερριτικού χάλυβα από την εργαλειοθήκη MTEX, και σε έναν ηλεκτροχάλυβα ονομασίας NO35. Οι χημικές συστάσεις και το θερμομηχανικό ιστορικό τους δεν είναι γνωστές παράμετροι. Στην συνέχεια, δημιουργήθηκαν RVE από τα δεδομένα εισόδου τους. Τα μεγέθη που απαιτούνται για τις μεθόδους που θα ακολουθήσουν, φαίνονται στον Πίνακα.

Πίνακας 4: Παράμετροι και αποτελέσματα δημιουργίας RVE των δύο ποιοτήτων χάλυβων.

Ποιότητες Χάλυβα	Ακμή RVE (μm)	Ανάλυση	Αριθμός Κόκκων ΠΔ	Αριθμός Κόκκων RVE	Αριθμός Ζευγαριών Γειτονικών Κόκκων ΠΔ	Αριθμός Ζευγαριών Γειτονικών Κόκκων ΠΔ
Φερριτικός Χάλυβας (mtex data Ferrite)	25	1	3966	1487	9033	6655
NO35 Electrical Steel	500	0.1	486	159	2564	855





Εικόνα 37: Σαρώσεις Περίθλασης Οπισθοσκεδαζόμενων Ηλεκτρονικών (E.B.S.D.) του φερριτικού (a.) και ηλεκτρικού χάλυβα, που χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία των αρχείων δεδομένων εισόδου, για κάθε περίπτωση.

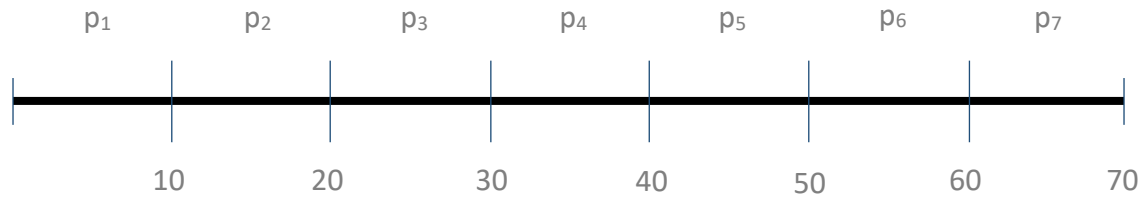
Η επιλογή των υλικών προς εξέταση έγινε με βάση δύο κριτήρια. Πρώτον, η μικροδομή τους να αποτελείται από μια μόνο φάση, χωρίς την ύπαρξη ενδομεταλλικών ή άλλων ενώσεων, και δεύτερον να έχουν διαφορετική κατανομή διαφορών προσανατολισμών. Ο ηλεκτρικός χάλυβας, λόγω της σχετικά κοντινής κατανομής με αυτή του Mackenzie, χρησιμοποιήθηκε ως δοκιμαστικό υλικό και στις δύο μεθόδους, ώστε να εξακριβωθεί η ομαλή λειτουργία αυτών, με σχετικά χαμηλό υπολογιστικό κόστος. Οι δοκιμές στον φερριτικό χάλυβα αποτελούσαν την πραγματική πρόκληση των μεθόδων που αναπτύχθηκαν.

Οι μέθοδοι που θα αναλυθούν παρακάτω, πραγματοποιούνται ως τελικό στάδιο κατά την δημιουργία ενός RVE με το συγκεκριμένο λογισμικό, και πιο συγκεκριμένα μετά την πλήρωση των κενών (Discrete Tessellation)

### 3.2.1 Μέθοδος 1: Βελτιστοποίηση Κατανομής Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού

Η πρώτη μέθοδο, βασίστηκε στις βασικές αρχές των Starelski et al. [50] και Miodownik και et al. [51]. Και οι δύο, ανέπτυξαν έναν αλγόριθμο Monte Carlo, ο οποίος διαλέγει βάσει τυχαίας κατανομής, δύο κόκκους από τα δεδομένα του RVE. Στην συνέχεια, ανταλλάσσει τους προσανατολισμούς τους, υπολογίζει τις νέες διαφορές προσανατολισμού των δύο κόκκων με τους γειτονικούς τους, και το σφάλμα. Στην περίπτωση που το σφάλμα είναι μικρότερο μετά την ανταλλαγή προσανατολισμών, αυτή εγκρίνεται και ανανεώνονται οι πληροφορίες των κόκκων του RVE. Διαφορετικά, απορρίπτεται, και ο αλγόριθμος συνεχίζεται με τα προηγούμενα δεδομένα προ της ανταλλαγής.

Η μεθοδολογία αυτή αφορά αποκλειστικά την βελτιστοποίηση της Συνάρτησης Κατανομής Γωνίας Διαφοράς Προσανατολισμού (Angle of Misorientation Distribution Function). Στο τεχνικό κομμάτι, πρώτο βήμα αποτελεί η διακριτοποίηση του πεδίου πιθανών γωνιών ( $0^{\circ}$ - $62.8^{\circ}$ ) σε ίσα διαστήματα.



Σχήμα 1: Παράδειγμα διακριτοποίησης του πεδίου δυνατών γωνιών διαφοράς προσανατολισμού σε 7 ίσα διαστήματα (Resolution=7)

Στην συνέχεια, χρησιμοποιώντας την μέθοδο των πυρήνων για την εκτίμηση συνάρτησης κατανομής πιθανότητας μονής παρατήρησης (Εξίσωση 21,  $d=1$ ), υπολογίζεται η πιθανότητα μιας γωνίας διαφοράς προσανατολισμού να βρίσκεται εντός κάποιου από τα διαστήματα. Το βήμα αυτό πραγματοποιείται τόσο στα δεδομένα εισόδου, όσο και στα αντίστοιχα του RVE.

Στην συνέχεια υπολογίζεται το σφάλμα μέσω της Εξίσωση 25.

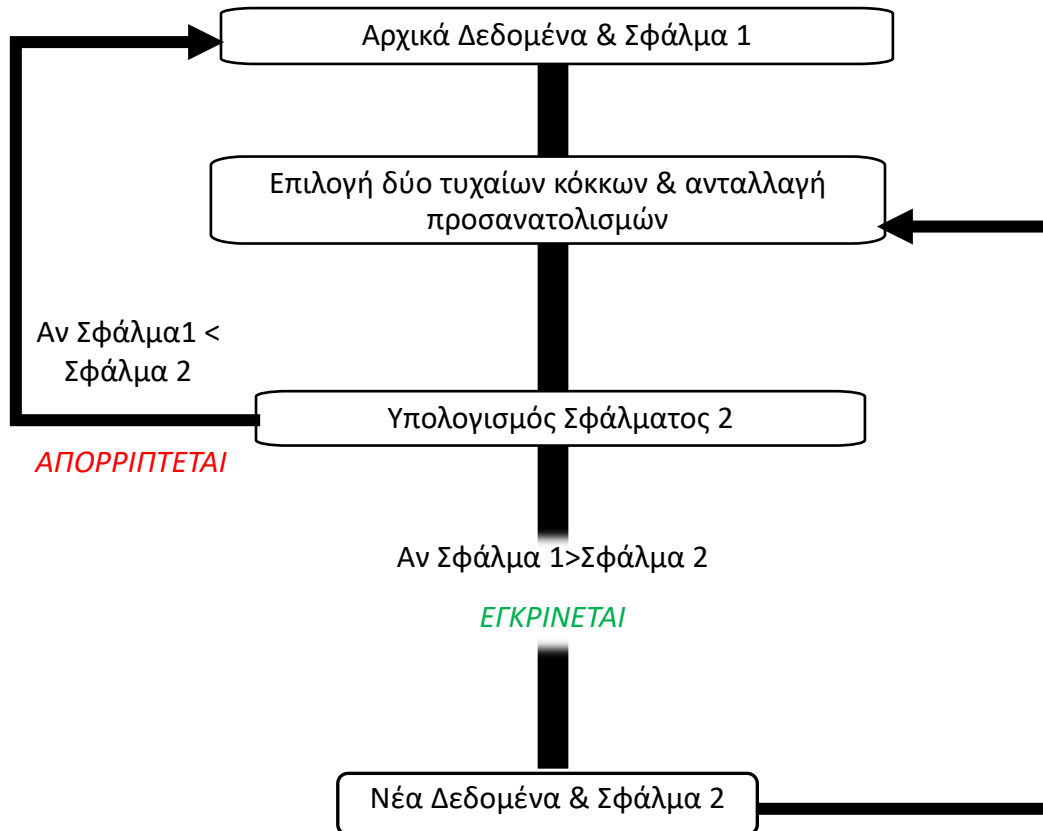
$$err = \sum_{i=1}^7 (adf_i^{exp} - adf_i^{opt})^2$$

Εξίσωση 25: Υπολογισμός σφάλματος Συναρτήσεων Κατανομής Γωνιών Προσανατολισμού πειραματικών και δεδομένων μετά την ανταλλαγή προσανατολισμών δύο κόκκων του RVE (Μέθοδος 1).

Όπου  $adf_{exp}$ , οι πιθανότητες των διαστημάτων των πειραματικών δεδομένων, και  $adf_{opt}$  οι αντίστοιχες των δεδομένων του RVE, μετά την ανταλλαγή προσανατολισμών δύο κόκκων.

Η μέθοδος αναπαρίσταται γραφικώς στο Σχήμα 2.





Σχήμα 2: Σχηματική αναπαράσταση μεθόδου Monte Carlo για την βελτιστοποίηση της Συνάρτησης Κατανομής Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού μεταξύ πειραματικών και RVE δεδομένων

Εφεξής, θα χρησιμοποιείται η ονομασία Βήμα Μεθόδου Monte Carlo (Monte Carlo Single Step), ή απλώς βήμα για την περιγραφή της προαναφερθείσας διεργασίας.

Όλοι οι υπολογισμοί διαφοράς προσανατολισμών πραγματοποιούνται με την χρήση τετραδιονίων (quaternions) αντί των ΠΔΠ. Κατά αυτό τον τρόπο, γίνεται εξοικονόμηση υπολογιστικού κόστους, αξιοποιώντας τις λιγότερες αριθμητικές πράξεις που προβλέπονται στον πολλαπλασιασμό διανυσμάτων σε σύγκριση με αυτό των πινάκων  $3 \times 3$ .

### 3.2.2 Μέθοδος 2: Βελτιστοποίηση Συνάρτησης Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού

Για την βελτιστοποίηση της MDF, απαιτούνται υπολογισμοί κατανομής σε κάποιον από τους τρισδιάστατους χώρους προβολής προσανατολισμών/διαφοράς προσανατολισμών. Ο χώρος που επιλέχθηκε για την βελτιστοποίηση ήταν αυτός του Rodriguez-Frank, για τους λόγους που αναφέρθηκαν στην παράγραφο 2.2.2.2.

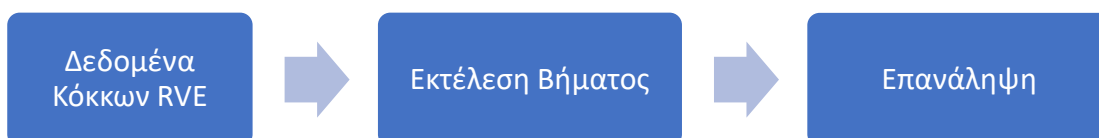
Στην βάση της προηγούμενης μεθόδου, πραγματοποιείται διακριτοποίηση των αξόνων  $r_1, r_2, r_3$  του χώρου RF, σε ίσα διαστήματα. Κατά αυτό τον τρόπο, δημιουργούνται κύβοι ίσου μεγέθους, οι οποίοι καθορίζουν τους περιορισμούς των τιμών των διανυσμάτων RF κατά τον υπολογισμό της πιθανότητας μιας διαφοράς προσανατολισμού. Η διακριτοποίηση αυτή πραγματοποιείται όπως φαίνεται στο Σχήμα 4. Προς το παρόν, δεν ήταν δυνατή η διακριτοποίηση του κελιού Mackenzie, για τεχνικούς λόγους, οι οποίοι συνδέονται με την δυσκολία προσαρμογής της γεωμετρίας του κελιού σε προγραμματιστικό περιβάλλον. Η MDF υπολογίζεται μέσω της Εξίσωσης, για  $d=3$ , ενώ το σφάλμα, μέσω της Εξίσωσης

$$err = \sum_{i=1}^{res^3} (mdf_i^{exp} - mdf_i^{opt})^2$$

Εικόνα 38: Υπολογισμός σφάλματος Συναρτήσεων Κατανομής Γωνιών Προσανατολισμού πειραματικών και δεδομένων μετά την ανταλλαγή προσανατολισμών δύο κόκκων του RVE (Μέθοδος 2).

που  $res$ , η ανάλυση (Resolution) της διακριτοποίησης.

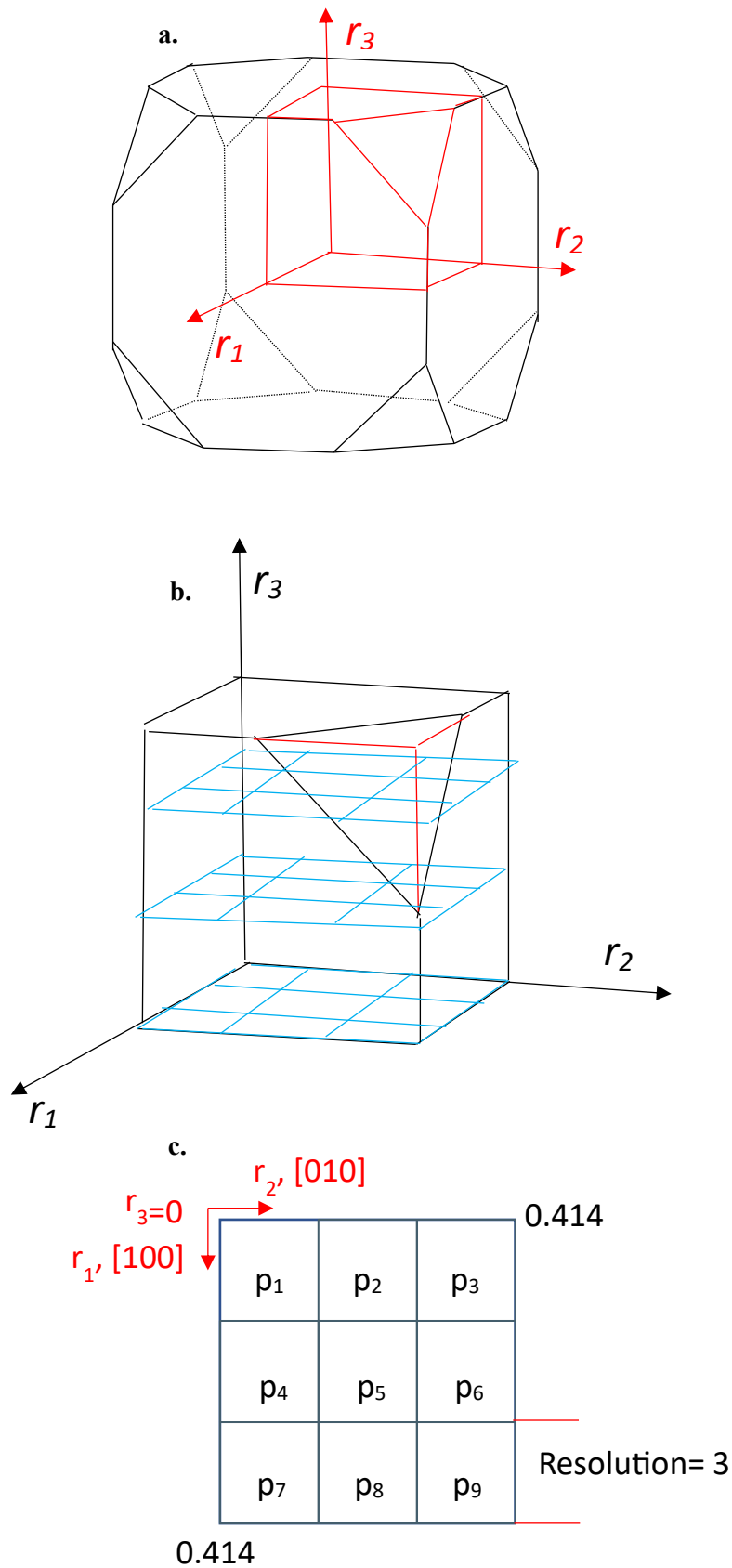
Στην πρώτη μέθοδο αναλύθηκε η κλασική προσέγγιση προβλημάτων με τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης Monte Carlo. Ωστόσο, μια τέτοια προσέγγιση στην περίπτωση της τρισδιάστατης εκτίμησης συνάρτησης κατανομής, που απαιτείται για την βελτιστοποίηση της MDF, δεν αποτελεί βέλτιστη από άποψη υπολογιστικού κόστους.



Σχήμα 3: Απλοποιημένο διάγραμμα ροής Μεθόδου 1

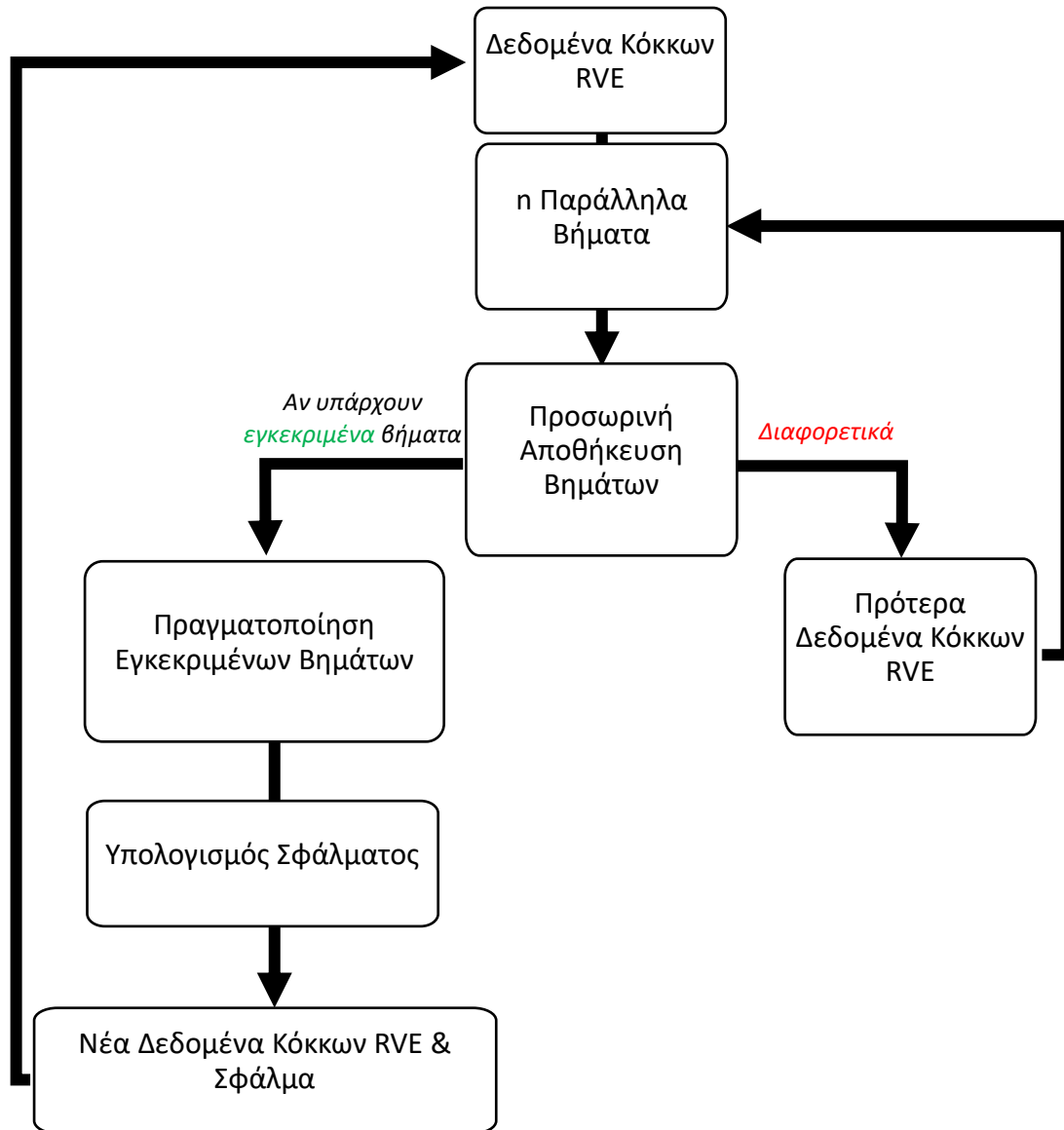
Βάσει προκαθορισμένων ρυθμίσεων της Python, το διάγραμμα ροής του Σχήμα 3, δεν εκμεταλλεύεται ολόκληρη την υπολογιστική ισχύ ενός συστήματος. Πιο συγκεκριμένα, το Βήμα Monte Carlo εκτελείται σε έναν λογικό πυρήνα (logical core), αδυνατώντας να εκμεταλλευτεί τους υπόλοιπους που ενδεχομένως κατέχει ένα σύστημα, καθιστώντας τους υπολογισμούς αρκετά χρονοβόρους.

Για την επίλυση αυτού, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της εκτέλεσης ταυτόχρονων πολλαπλών διεργασιών της Python (Python Multiprocessing), η οποία δίνει την δυνατότητα εκτέλεσης παράλληλων βημάτων, διανέμοντας κάθε βήμα, στους λογικούς πυρήνες του συστήματος [52].



Σχήμα 4: Βασική αρχή διακριτοποίησης του κυβοειδούς θετικών τιμών διανυσμάτων του χώρου RF. (α) Θέση κυβοειδούς στον χώρο RF, (β) Διακριτοποίηση του κυβοειδούς, με ανάλυση (Resolution)=3 (c) Δισδιάστατη τομή του διακριτοποιημένου κυβοειδούς για  $r_3=0$

Αφού εκτελεστούν τα βήματα (παράλληλα), αυτά αποθηκεύονται προσωρινώς. Στην περίπτωση που υπάρχουν βήματα που μειώνουν το σφάλμα, αυτά διατηρούνται και ο αλγόριθμος εκτελείται ξανά.. Διαφορετικά, δεν γίνεται καμιά αλλαγή στα δεδομένα του RVE, και ο αλγόριθμος συνεχίζεται. Η νέα αυτή μεθοδολογία (Σχήμα 5), εκμεταλλεύεται πλήρως την υπολογιστική ισχύ ενός συστήματος, ολοκληρώνοντας τα απαραίτητα βήματα του αλγορίθμου σαφώς γρηγορότερα από την σειριακή μέθοδο (Σχήμα 3).

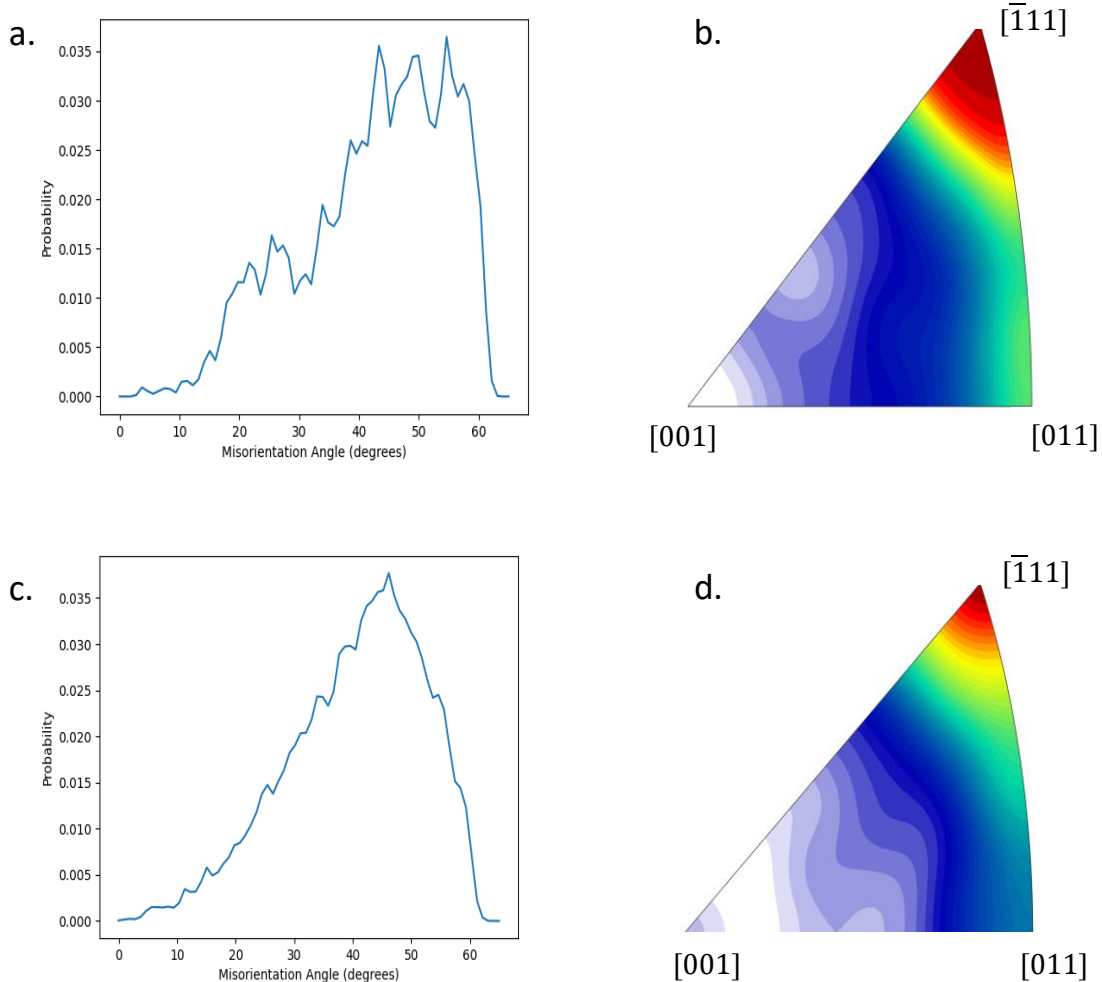


Σχήμα 5: Σχηματική Αναπαράσταση Μεθόδου 2 (n = αριθμός λογικών πυρήνων συστήματος)

## 4. Αποτελέσματα και Συζήτηση

### 4.1 Αποτελέσματα Μεθόδου 1 στον Ηλεκτρικό Χάλυβα

Η πρώτη εφαρμογή των μεθόδων πραγματοποιήθηκε στα δεδομένα του ηλεκτρικού χάλυβα, καθώς παρουσιάζει αρκετά κοντινές κατανομές, όπως φαίνεται στο Διάγραμμα 3.



Διάγραμμα 3: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών και Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού για τα πειραματικά δεδομένα (a,b) και του μη βελτιστοποιημένου RVE (κατανομές Mackenzie) (c,d).

Η διαφοροποίηση των κατανομών των δύο δεδομένων έγκειται στην αυξημένη παρουσία ορίων με γωνίες διαφοράς προσανατολισμού στο διάστημα  $17^{\circ}$ - $30^{\circ}$  στα πειραματικά δεδομένα, καθώς και στην πλήρη απουσία αξόνων  $[001]$  σε αυτά, σε σχέση με τις κατανομές Mackenzie.

Οι μαθηματικές και τεχνικές παράμετροι της προσομοίωσης φαίνονται στους Πίνακες 5 και Πίνακας 6, αντίστοιχα.

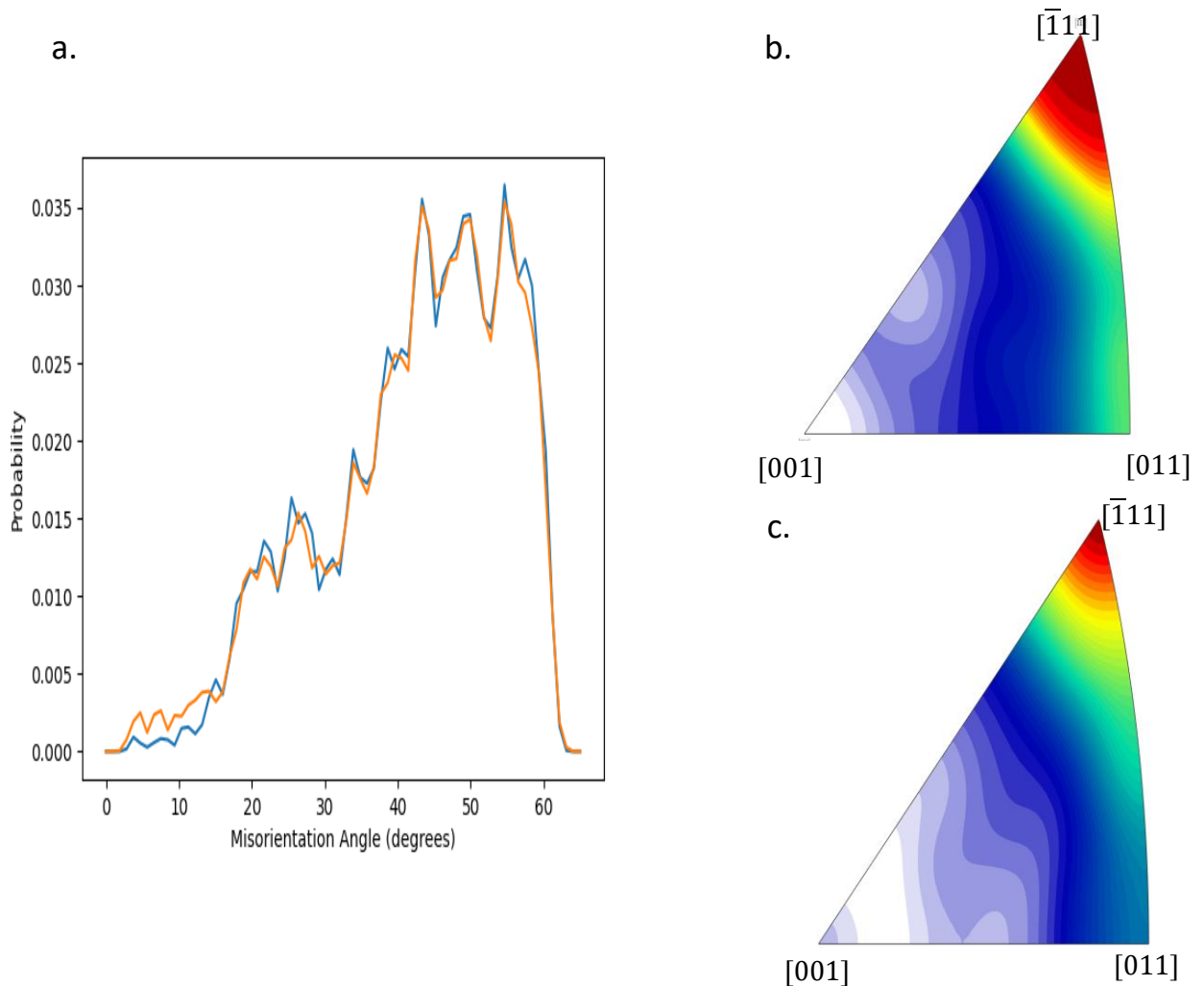
Πίνακας 5: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1)

Αριθμός Βημάτων	Ανάλυση (Resolution) πεδίου πιθανών Γωνιών	Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα	Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)
-----------------	--	---------------------------	-----------------------------

Διαφοράς Προσανατολισμού			
1200	70	Gaussian	4

Πίνακας 6: Τεχνικές παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1)

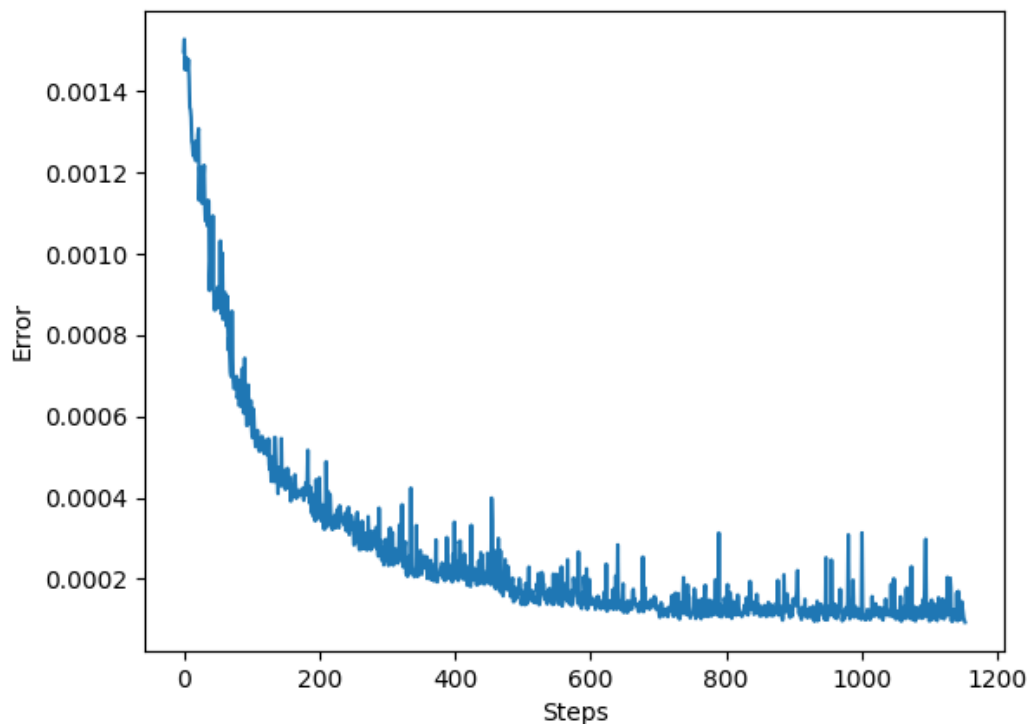
Επεξεργαστής	Λογικοί Πυρήνες	Ταχύτητα	Χρόνος Ολοκλήρωσης (min)
AMD Ryzen 5 3500U	8	2.1 GHz	7



Διάγραμμα 4: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

Παρατηρείται ότι η μέθοδος, με απόλυτη επιτυχία, βελτιστοποίησε την Συνάρτηση Κατανομής Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού (Διάγραμμα 4). Ωστόσο, παρά την μαθηματική συσχέτιση της γωνίας με τους δείκτες Miller του άξονα διαφοράς προσανατολισμού, δεν φαίνονται ιδιαίτερες διαφορές στην Συνάρτηση Κατανομής Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού, σε σχέση με αυτή πριν την έναρξη του αλγορίθμου.

Στο Διάγραμμα 5, φαίνεται η εξέλιξη του σφάλματος συναρτήσει των βημάτων του αλγορίθμου.

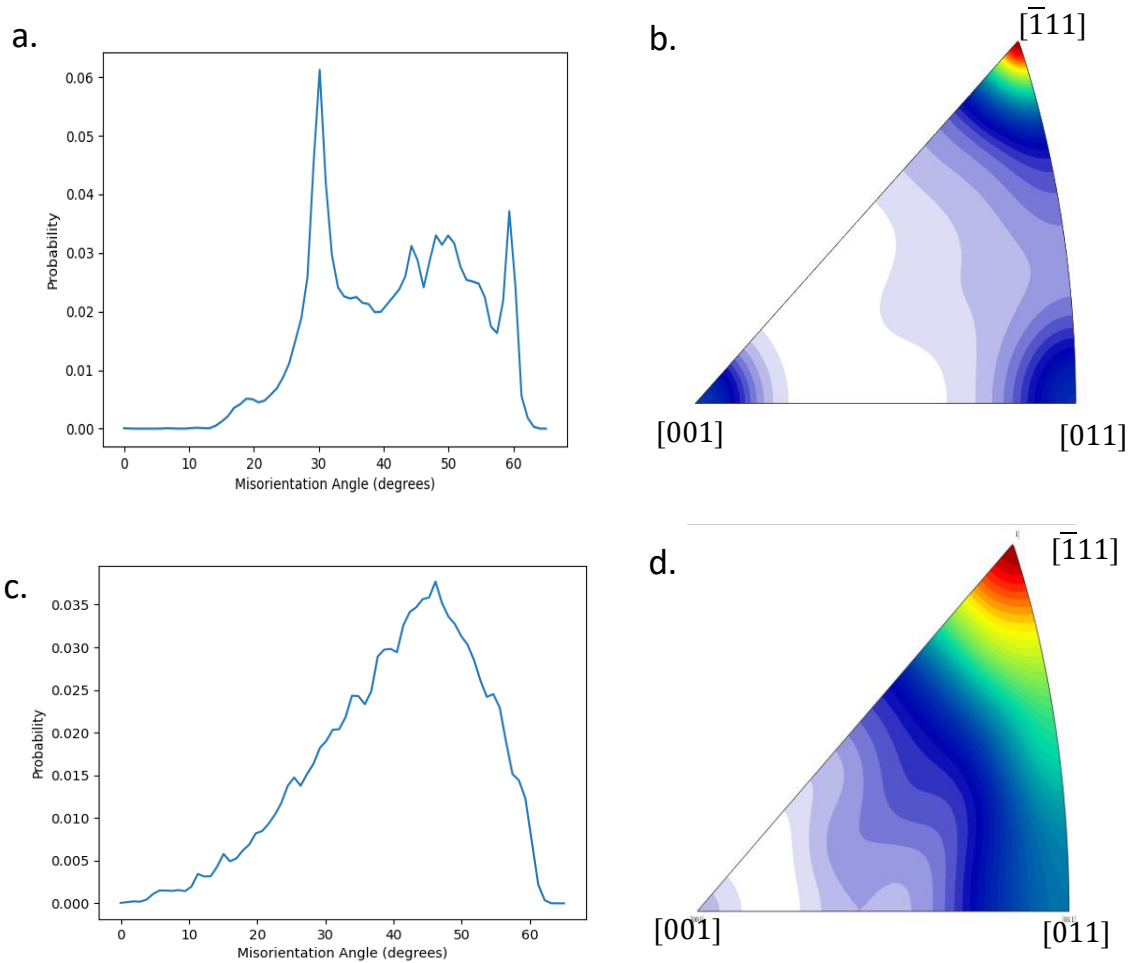


Διάγραμμα 5: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσει του βήματος αλγορίθμου (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

Το σφάλμα ακολουθεί εκθετική κατανομή, όπου στα πρώτα βήματα το ποσοστό εγκεκριμένων βημάτων είναι πολύ υψηλό, και βαίνει μειούμενο όσο προχωρεί. Κατά αυτόν τον τρόπο, ενδεχόμενη αύξηση των βημάτων δεν είναι υπολογιστικά βέλτιστη, μιας και δεν διαφοροποιεί σημαντικά το αποτέλεσμα, καθώς η κατανομή τείνει να έρθει σε παραλληλία με τον άξονα x. Διακοπή του αλγορίθμου βελτιστοποίησης στα 800 βήματα, θα ήταν εξίσου δεκτή και υπολογιστικά ωφέλιμη.

#### 4.2 Αποτελέσματα Μεθόδου 1 στον Φερριτικό Χάλυβα

**Σ**την συνέχεια εξετάστηκε και η περίπτωση του φερριτικού χάλυβα, ο οποίος παρουσιάζει εντελώς διαφοροποιημένες κατανομές, σε σχέση με τις Mackenzie.



Διάγραμμα 6: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών και Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού για τα πειραματικά δεδομένα (a,b) και του μη βελτιστοποιημένου RVE (κατανομές Mackenzie) (c,d).

Η πειραματική κατανομή γωνιών διαφοράς προσανατολισμού του φερριτικού χάλυβα έχουν κορυφές στις 30° και 60°, ενώ το διάστημα 40°-50°, εκεί όπου η Mackenzie, εμφανίζει μέγιστο, βρίσκεται αρκετά ταπεινωμένο στα πειραματικά δεδομένα. Αντίστοιχη εικόνα και στις κατανομές αξόνων διαφοράς προσανατολισμού, όπου στην πειραματική, οι άξονες είναι συγκεντρωμένοι στους πόλους. Ως συνέπεια της μεγάλης διαφοράς που είναι εμφανής στις κατανομές, απαιτούνται και περισσότερα βήματα, για την επίτευξη της βελτιστοποίησης

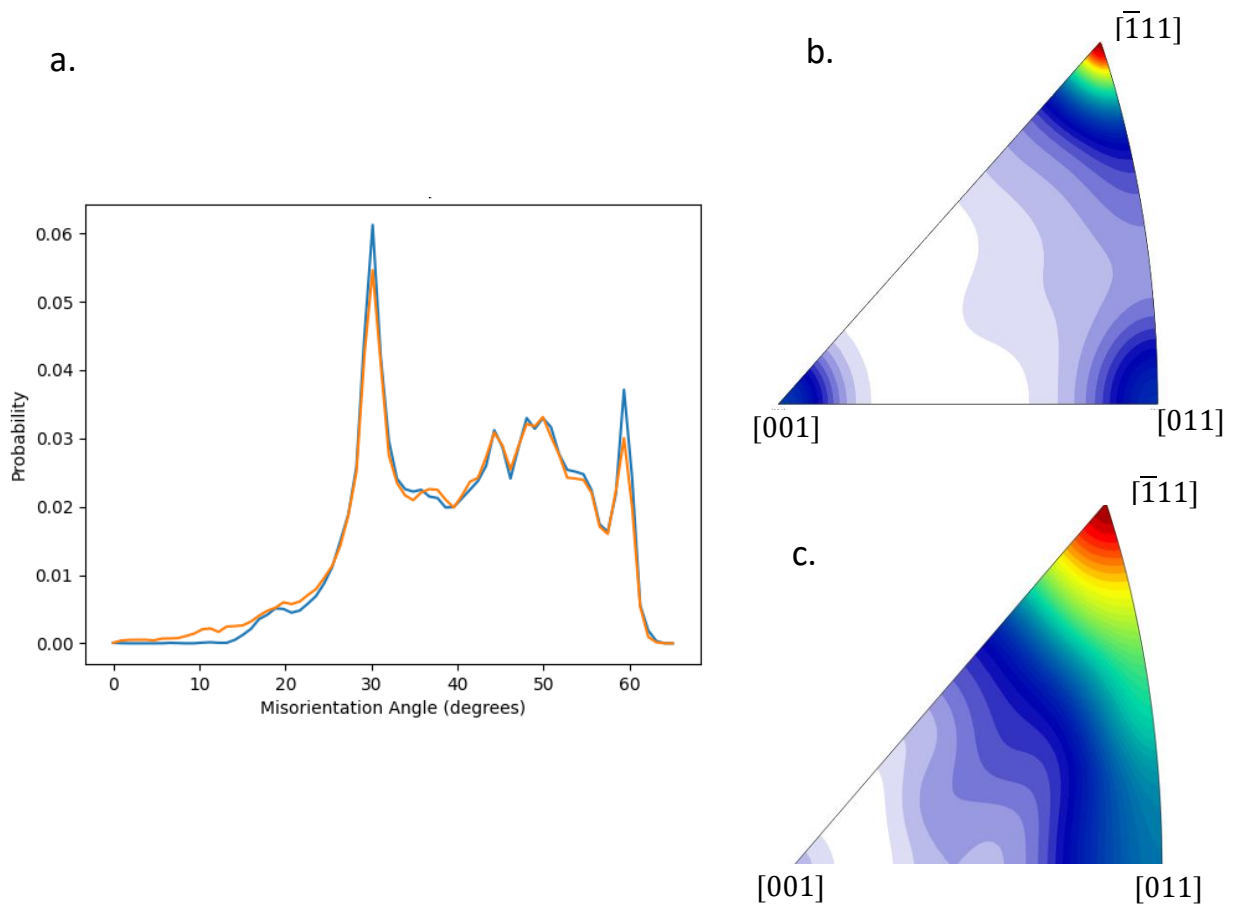
Πίνακας 7: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

Αριθμός Βημάτων	Ανάλυση (Resolution) πεδίου πιθανών Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού	Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα	Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)
6000	70	Gaussian	4

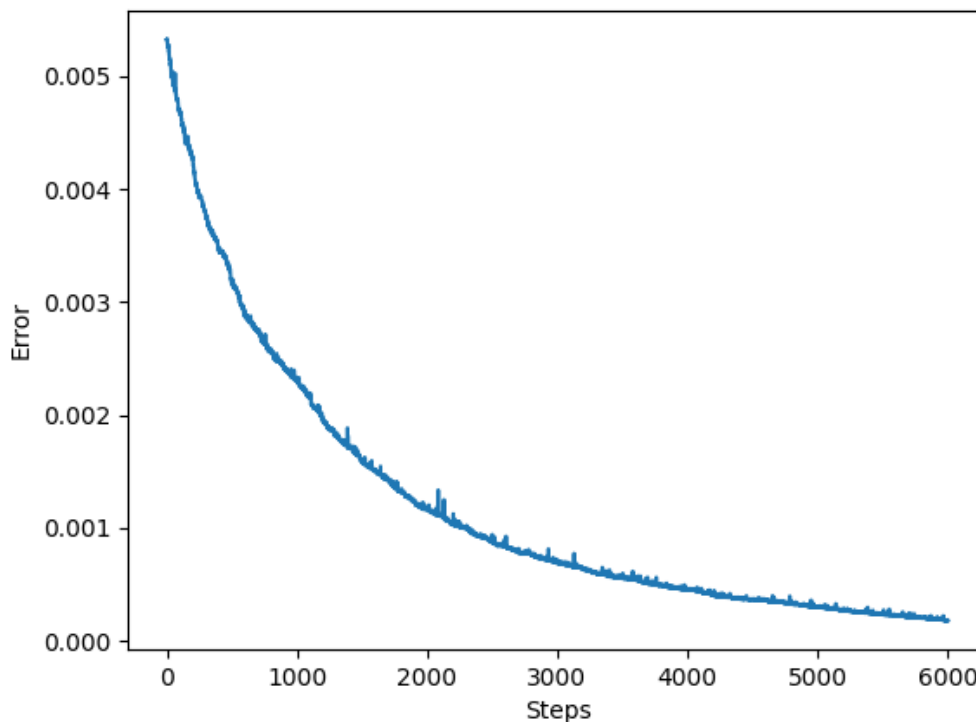


Πίνακας 8: Τεχνικές παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

Επεξεργαστής	Λογικοί Πυρήνες	Ταχύτητα	Χρόνος Ολοκλήρωσης (min)
AMD Ryzen 5 3500U	8	2.1 GHz	20



Διάγραμμα 7: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).



Διάγραμμα 8: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσεως του βήματος αλγορίθμου (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

Στο συγκεκριμένο υλικό, ο ιστός αποτελείται από προσανατολισμούς της  $\alpha$ -fibre FCC, καθώς και από το κρυσταλλογραφικό συστατικό Goss. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, ο ιστός δεν παρουσιάζει διαφορές πριν και μετά την βελτιστοποίηση.

Τα ίδια αποτελέσματα με την περίπτωση του ηλεκτρικού χάλυβα, παρατηρούνται και για τα δεδομένα του φερριτικού. Είναι εμφανές ότι με την χρήση αλγορίθμου Monte Carlo, το πρόβλημα μπορεί να έχει λύση, στην κατεύθυνση που του έχει δοθεί, με γνώμονα το σφάλμα και την συνάρτηση που πρέπει να βελτιστοποιηθεί. Ελάττωμα της συγκεκριμένης προσέγγισης είναι μη βελτιστοποιημένη Συνάρτηση Κατανομής Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμών.

#### 4.3 Αποτελέσματα Μεθόδου 2 στον Ηλεκτρικό Χάλυβα

**Η** Μέθοδος 2 δοκιμάζεται, καταρχάς, στα δεδομένα του Ηλεκτρικού Χάλυβα, λόγω μικρής διαφοράς στις κατανομές δεδομένων διαφοράς προσανατολισμών, όπως πραγματοποιήθηκε και στην προηγούμενη Μέθοδο. Λόγω του πλήθους των υπολογισμών που προβλέπονται στην Μέθοδο 2, για την εκτέλεση του αλγορίθμου βελτιστοποίησης, τόσο στον ηλεκτρικό όσο και στο φερριτικό χάλυβα χρησιμοποιήθηκε ειδικός υπολογιστής της Σχολής Μεταλλειολόγων-Μεταλλουργών Μηχανικών, τα χαρακτηριστικά του οποίου φαίνονται στον Πίνακα 9.

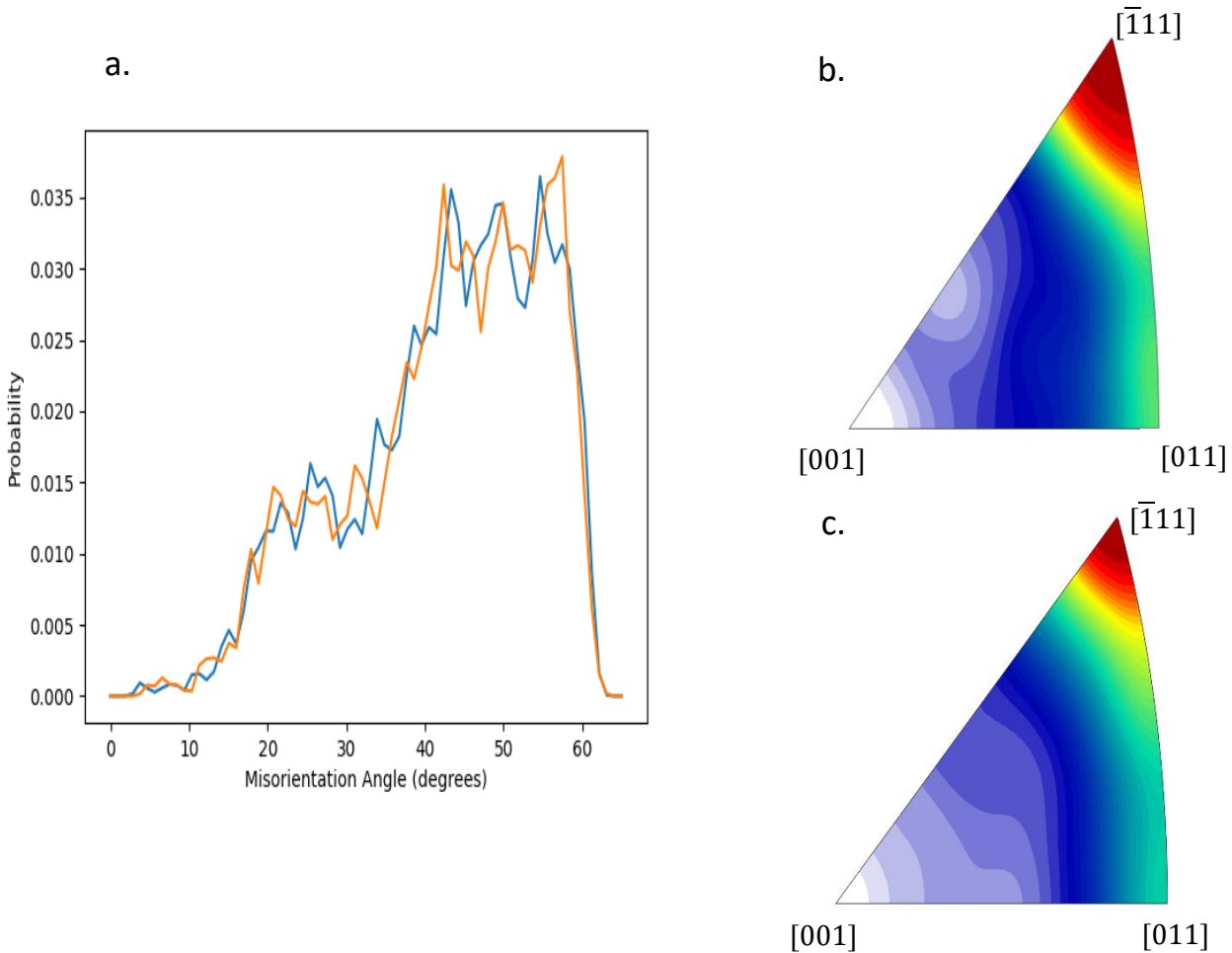
Πίνακας 9: Χαρακτηριστικά υπολογιστή cluster που χρησιμοποιήθηκε για την Μέθοδο 2.

Επεξεργαστής	Λογικοί Πυρήνες	Ταχύτητα
Intel Xeon ES-2670 V3	24	2.3 GHz

Οι παράμετροι της Μεθόδου που επιλέχθηκαν, φαίνονται στον Πίνακα 10

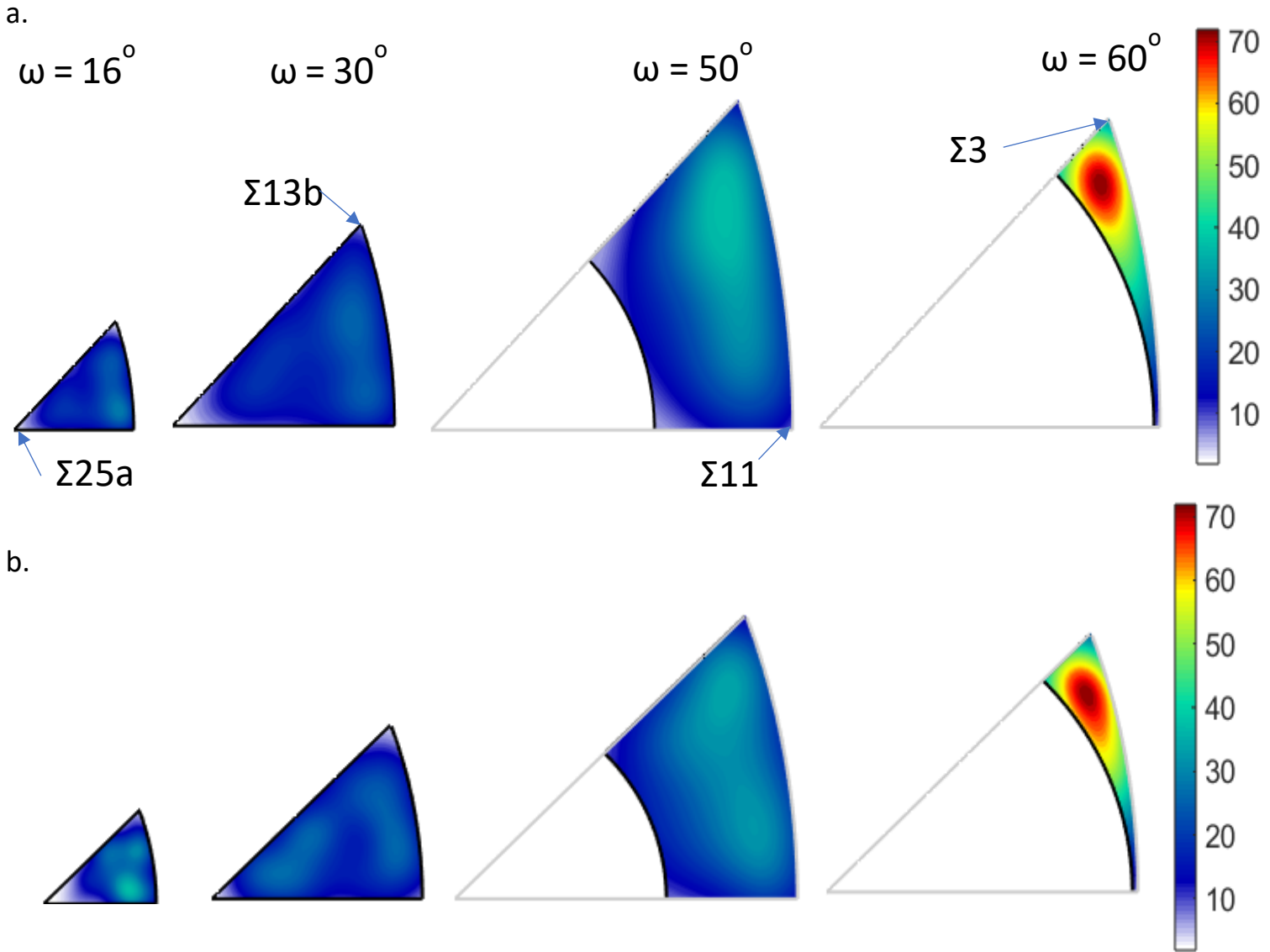
Πίνακας 10: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

Αριθμός Βημάτων	Ανάλυση (Resolution) κυβοειδούς του χώρου RF	Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα	Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)	Χρόνος Ολοκλήρωσης (hr)
50000	10	Gaussian	4	7



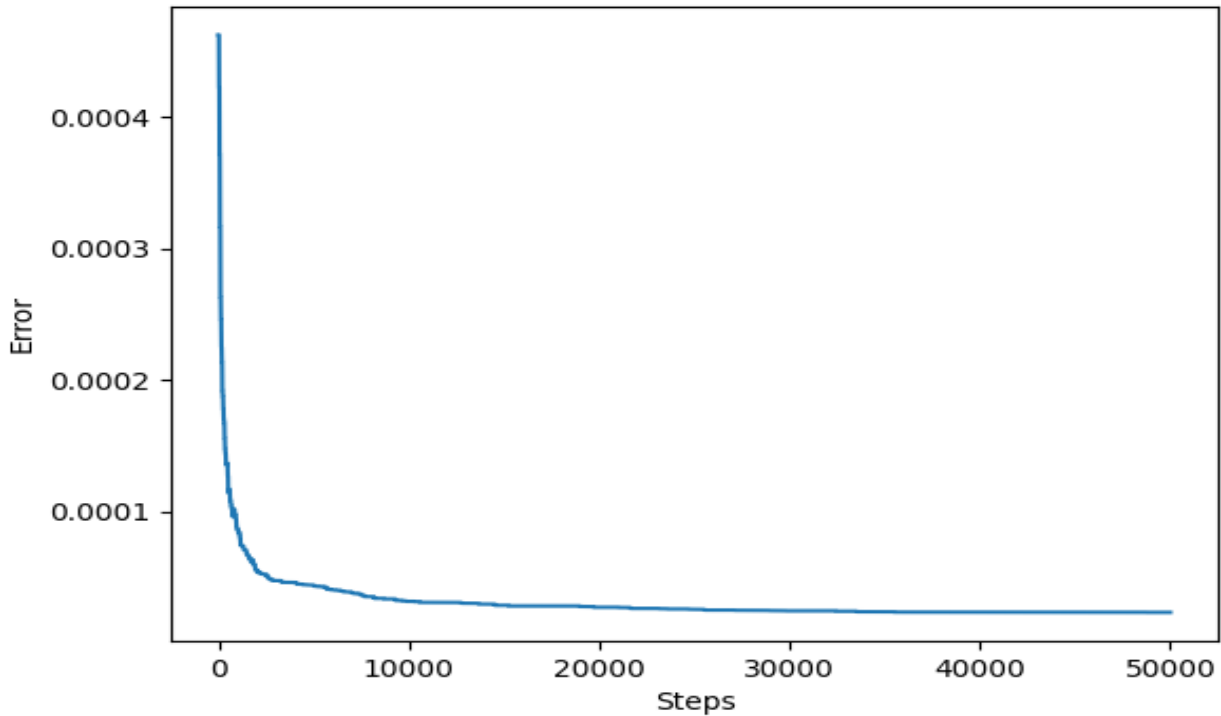
Διάγραμμα 9: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

Η συγκεκριμένη προσέγγιση με επιτυχία διόρθωσε το ελάττωμα της Μεθόδου 1, καθώς έχουμε πλήρης βελτιστοποίηση των Συναρτήσεων Κατανομών τόσο των Γωνιών όσο και των Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού, κάτι που φαίνεται επίσης και στο Διάγραμμα 10, όπου παρουσιάζεται η MDF των πειραματικών και του RVE, μετά το πέρας του αλγορίθμου, σε τμήματα του κυλινδρικού χώρου γωνίας άξονα.



Διάγραμμα 10: (α) Πειραματική και (β) βελτιστοποιημένη Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού στον Κυλινδρικό Χώρο Γωνίας/Άξονα (Ηλεκτρικός Χάλυβας)

Όσον αφορά το σφάλμα, βάσει του Διάγραμμα 11, μπορεί να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι ολοκλήρωση του αλγορίθμου στα 10000 βήματα, θα ήταν πιο βέλτιστη από άποψη υπολογιστικού κόστους, καθώς έχει ξεπεραστεί το όριο στο οποίο αύξηση των βημάτων οδηγεί σε μείωση του σφάλματος.



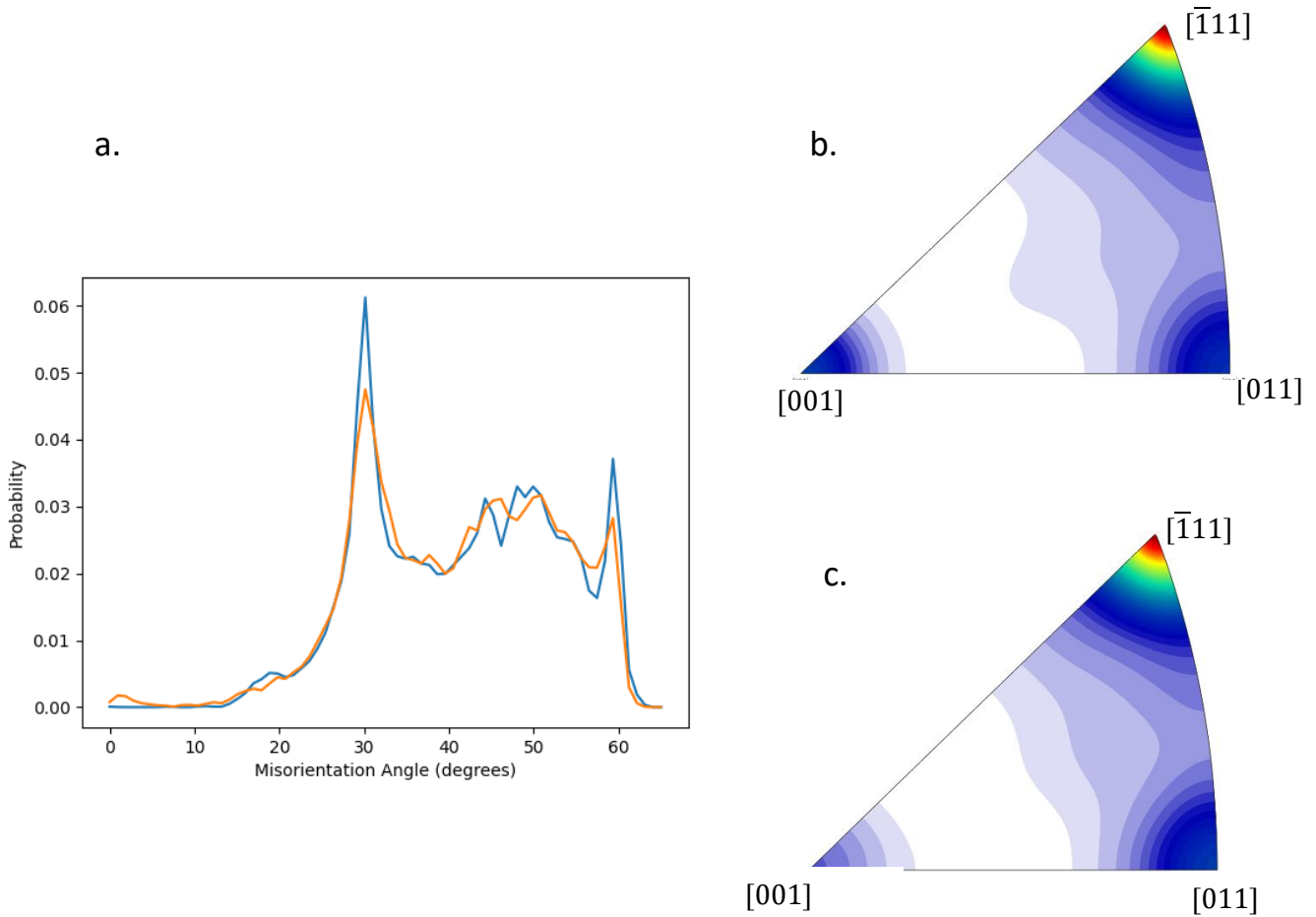
Διάγραμμα 11: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσει του βήματος αλγορίθμου (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

#### 4.4 Αποτελέσματα Μεθόδου 2 στον Φερριτικό Χάλυβα

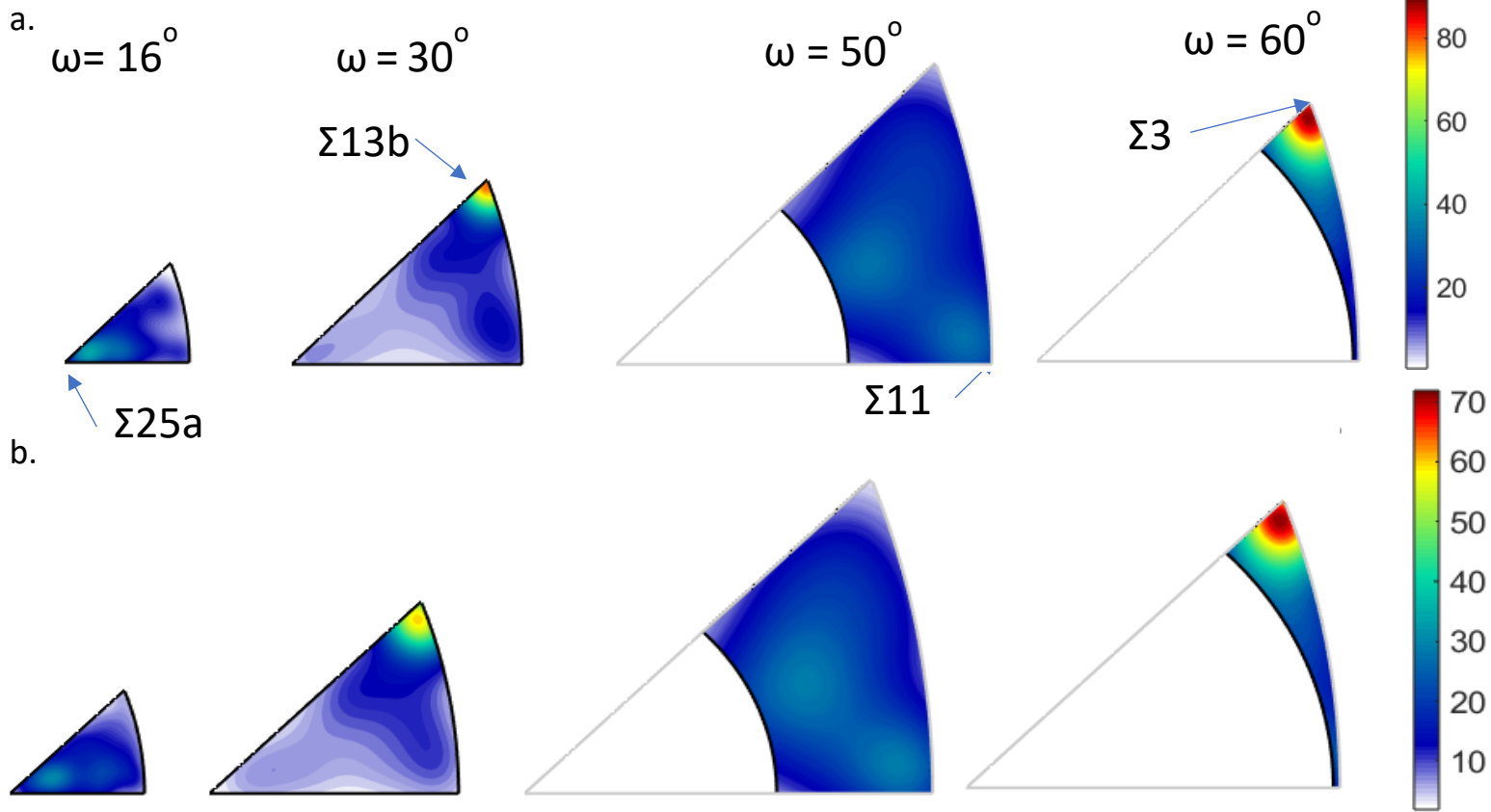
Λόγω της σημαντικής διαφοράς που παρουσιάζουν οι πειραματικές κατανομές του φερριτικού χάλυβα με τις Mackenzie, και σε αυτή την μέθοδο θα απαιτηθεί μια διαφοροποίηση των παραμέτρων. Εκτός της αύξησης των βημάτων, πραγματοποιήθηκε και αύξηση της ανάλυσης (resolution) του κυβοειδούς του χώρου RF.

Πίνακας 11: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

Αριθμός Βημάτων	Ανάλυση (Resolution) κυβοειδούς του χώρου RF	Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα	Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)	Χρόνος Ολοκλήρωσης (hr)
<b>50000</b>	31	Gaussian	4	16

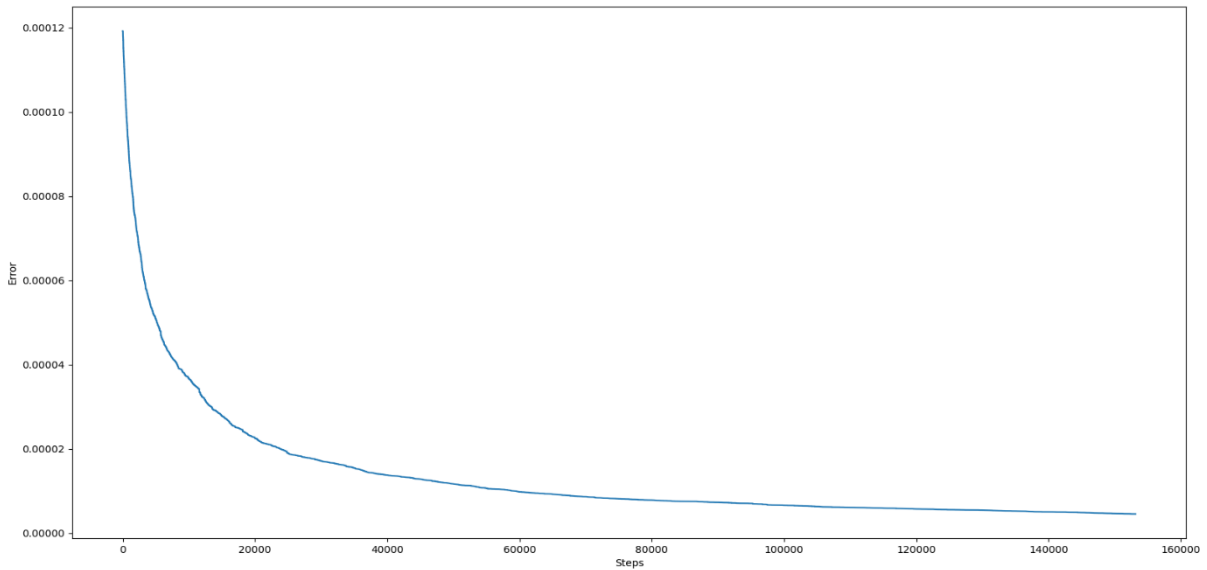


Διάγραμμα 12: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).



Διάγραμμα 13: (α) Πειραματική και (β) βελτιστοποιημένη Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού στον Κυλινδρικό Χώρο Γωνίας/Άξονα (Φερριτικός Χάλυβας)

Η Μέθοδος 2 επιτυγχάνει και στην περίπτωση του φερριτικού χάλυβα να βελτιστοποιήσει την MDF του RVE. Σε αυτή την περίπτωση, η επιλογή των βημάτων του αλγορίθμου κρίνεται υπολογιστικά στοχευμένη, καθώς αυτός σταμάτησε λίγο πριν η κατανομή του σφάλματος βρεθεί σε σχεδόν «παράλληλη» πορεία με τον άξονα x.



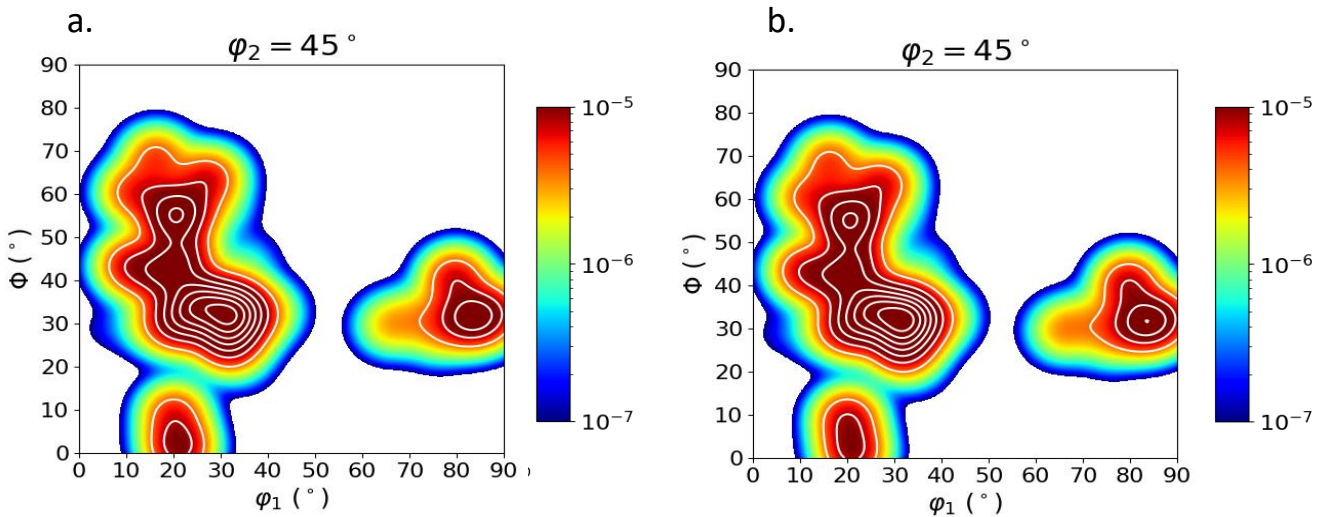
Διάγραμμα 14: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσει του βήματος αλγορίθμου (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

#### 4.5 Επίδραση των Μεθόδων στην ODF του Στοιχείου Αντιπροσωπευτικού Όγκου.

Σύμφωνα με την Εξίσωση, η ODF εξαρτάται από το κλάσμα όγκου κόκκου κάθε προσανατολισμού, προς τον όγκο του υλικού. Και οι δύο Μέθοδοι περιλαμβάνουν ανταλλαγές προσανατολισμών μεταξύ κόκκων, οι οποίοι ενδεχομένως να έχουν διαφορετικούς όγκους, και έτσι να επηρεάζεται η ODF. Για τον λόγο αυτό, κρίνεται σκόπιμη η σύγκριση των ODF πριν και μετά την εκτέλεση των μεθόδων. Το λογισμικό DRAGen είναι ικανό να υπολογίζει και να δημιουργεί διαγράμματα ODF, χρησιμοποιώντας την μέθοδο των πυρήνων για την εκτίμηση κατανομής πιθανότητας, οι παράμετροι της οποίας φαίνονται στον Πίνακα 12

Πίνακας 12: Παράμετροι μεθόδου πυρήνων (Kernel Density Estimation) για τον υπολογισμό της ODF μέσω του λογισμικού DRAGen

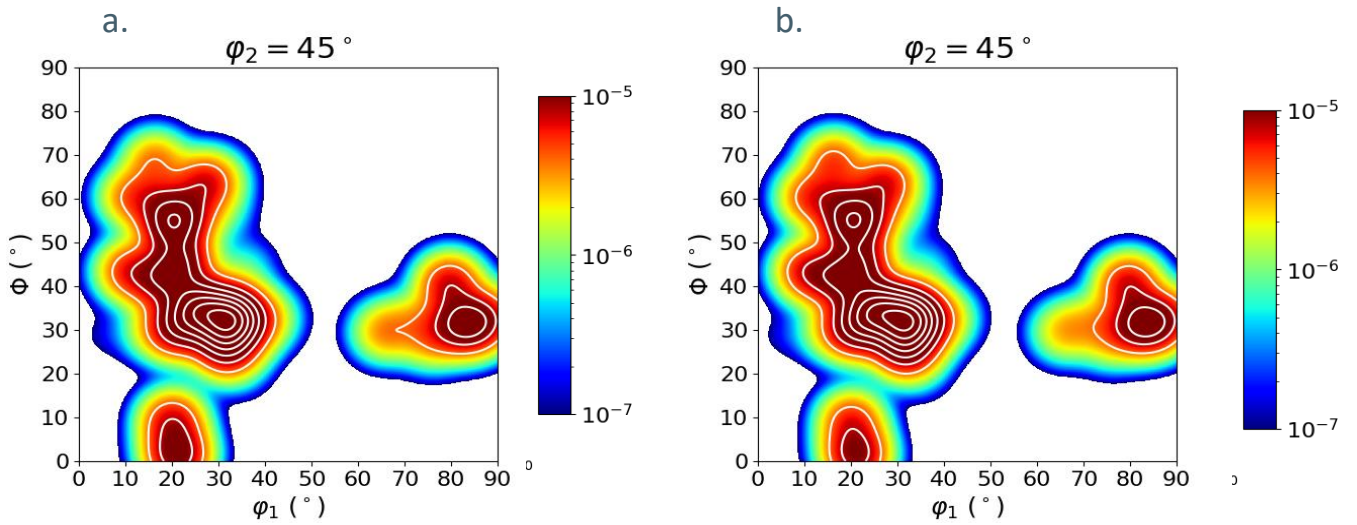
Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα	Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)	Ανάλυση (Resolution)
Gaussian	4	256



Διάγραμμα 15: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).

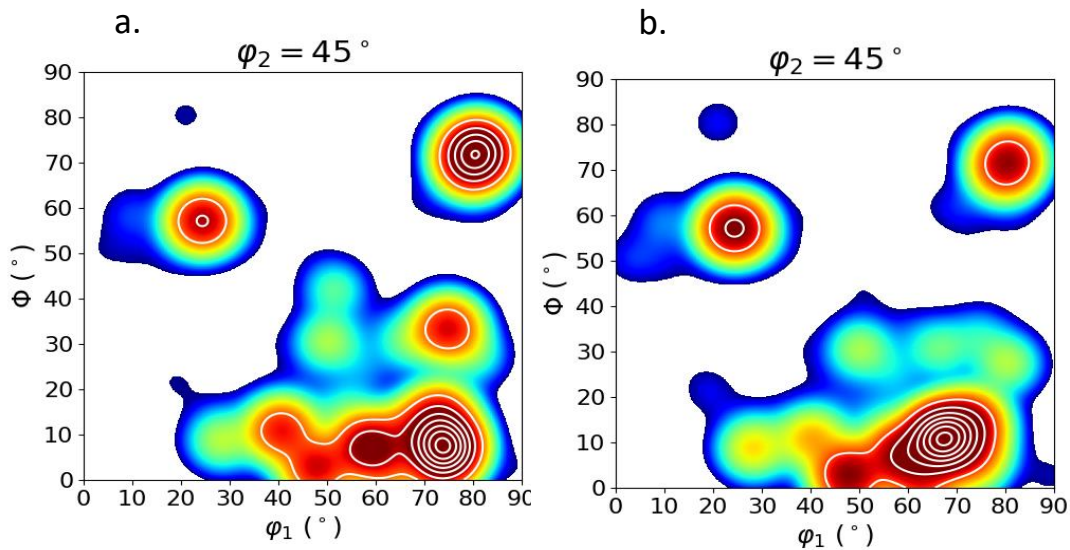
Ο ιστός του ηλεκτρικού χάλυβα αποτελείται κατά βάση από δύο ίνες, μια ημιτελής γ-ίνα και μια ίνα κατά μήκος των  $20^\circ$  της  $\phi_1$ . Παρατηρείται ότι, ο ιστός μεταξύ των δύο καταστάσεων, δεν παρουσιάζει ιδιαίτερες διαφορές, και στις δύο μεθόδους (Διάγραμμα 15 Διάγραμμα 17).



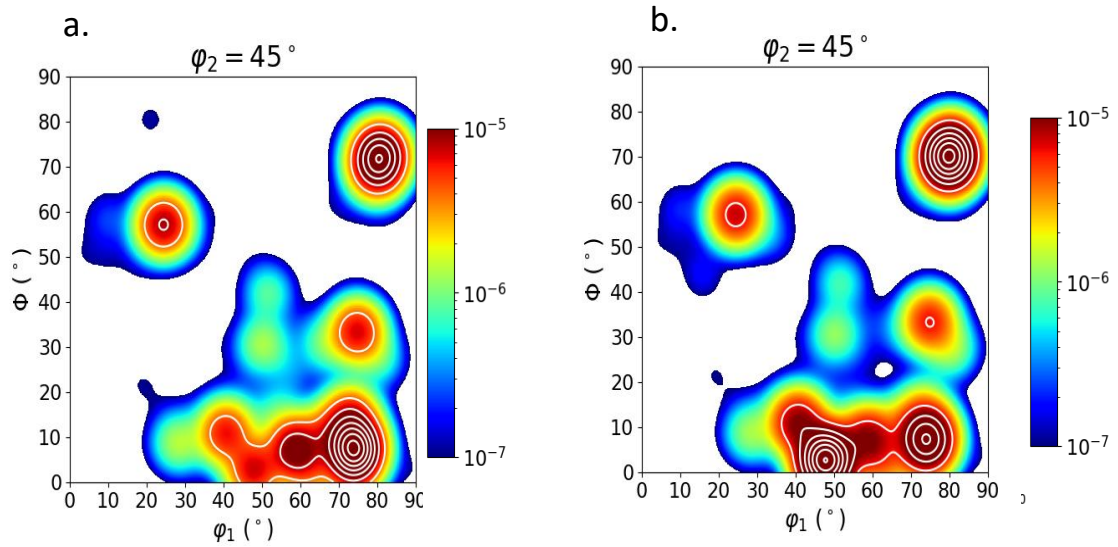


Διάγραμμα 16: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).

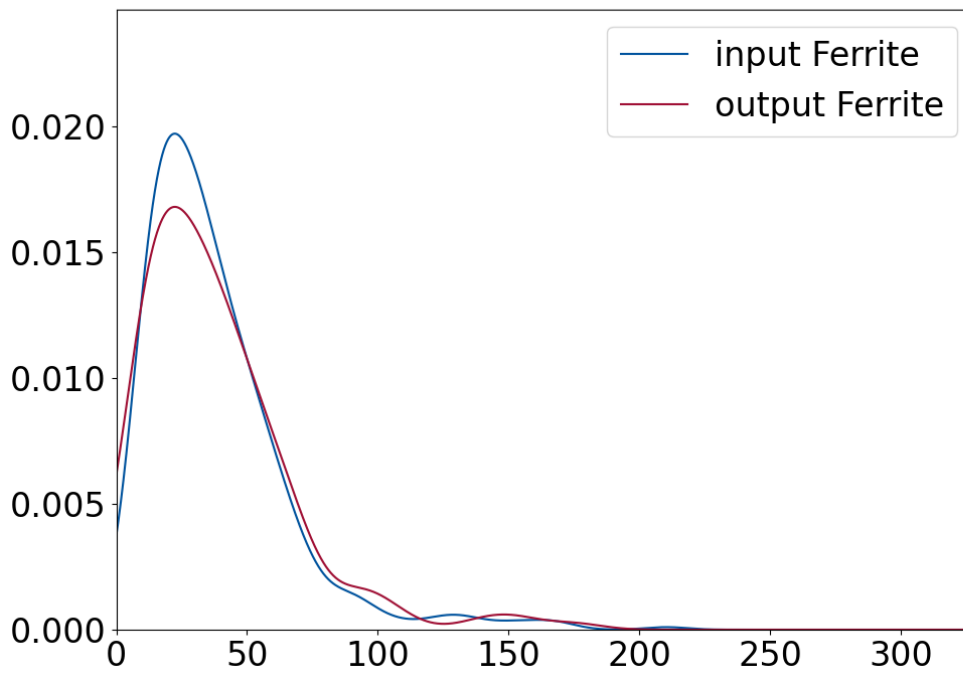
Και στην περίπτωση του φερριτικού χάλυβα, οι δύο μέθοδοι δεν διαφοροποίησαν ιδιαίτερα την ODF μετά την βελτιστοποίηση. Εξήγηση στο γεγονός αυτό έρχεται να δώσουν οι κατανομές μεγέθους κόκκου των RVEs που φαίνονται στα Διάγραμμα 19 Διάγραμμα 20.



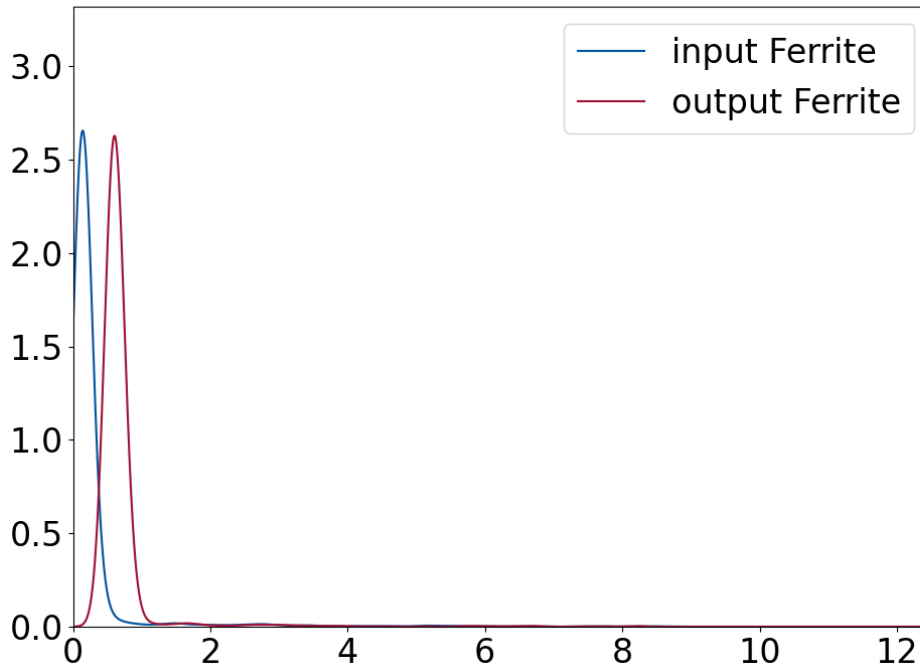
Διάγραμμα 17: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).



Διάγραμμα 18: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).



Διάγραμμα 19: Κατανομή μεγέθους κόκκων μεταξύ πειραματικών (μπλε) και δεδομένων RVE (κόκκινο) για τον ηλεκτρικό χάλυβα.



Διάγραμμα 20: Κατανομή μεγέθους κόκκων μεταξύ πειραματικών (μπλε) και δεδομένων RVE (κόκκινο) για τον φερριτικό χάλυβα.

Παρατηρείται μια ομοιογένεια των δύο μικροδομών ως προς τα μεγέθη κόκκου τους, με την κανονικοποιημένη πιθανότητα (normalized density) να βρίσκει κορυφή σε μικρά μεγέθη κόκκων. Αυτό συνεπάγεται με μεγαλύτερη πιθανότητα επιλογής δύο κόκκων με μικρό και παρόμοιο μέγεθος, και συνεπώς, η ανταλλαγή των προσανατολισμών τους, δεν επηρεάζει την Συνάρτηση Κατανομής Προσανατολισμών (ODF).

## 5. Συμπεράσματα

Οι μεθοδολογίες που αναπτύχθηκαν, ήταν επιτυχείς ως προς την βελτιστοποίηση παραμέτρων διαφορών προσανατολισμού ενός RVE, σε σχέση με πειραματικές κατανομές.

Αρχικά, η Μέθοδος 1, που βρέθηκε βιβλιογραφικά, χρησιμοποιήθηκε ως δοκιμαστική, ώστε να εξακριβωθούν τα αποτελέσματα της. Παρά το ελάττωμα της μη βελτιστοποίησης της Συνάρτησης Κατανομής Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμών, τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης προσέγγισης οδήγησαν στα εξής συμπεράσματα:

- i. Ο αλγόριθμος Monte Carlo, είναι ασφαλής προσέγγιση για την λύση του παραβλήματος. Με τις κατάλληλες τροποποιήσεις, μπορεί να μας οδηγήσει στην βελτιστοποίηση της MDF.
- ii. Ο ιστός διατηρείται σταθερός κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου

Δεδομένου ότι η Συνάρτηση Κατανομής Προσανατολισμών (ODF), εξαρτάται από το κλάσμα όγκου που συναντάται ο κάθε προσανατολισμός σε μια μικροδομή, το ii. Αποτελεί σημαντική παράμετρος του αλγορίθμου, καθώς σε πρώτη ανάλυση, επιλογή κόκκων με διαφορετικούς όγκους ο καθένας, και ανταλλαγή των προσανατολισμών αυτών, θα έπρεπε να επηρεάζει το κλάσμα όγκου των προσανατολισμών αυτών και, συνεπώς, και την ODF.

Στους Πίνακες, δόθηκαν τιμές εισόδου οι οποίες κρίνονται απαραίτητες για την εκτέλεση των μεθόδων. Βάσει αυτών, οι άμεσες παράμετροι από τις οποίες εξαρτάται η πορεία του αλγορίθμου είναι οι εξής:

- Αριθμός Βημάτων
- Ανάλυση (Resolution)
- Συνάρτηση Καμπύλης Πυρήνα
- Πλάτος Καμπύλης (Bandwidth)

Όπως φαίνεται στον Πίνακα, μπορεί το RVE του φερριτικού χάλυβα να είναι σαφώς μικρότερο από ότι το αντίστοιχο του ηλεκτρικού, ωστόσο, περιέχει περισσότερα δεδομένα όσο αφορά τον αριθμό και την λίστα ζευγαριών γειτονικών κόκκων. Εμμέσως, και οι τιμές εισόδου για την δημιουργία του RVE, επηρεάζουν τα δεδομένα που θα χρησιμοποιηθούν μετέπειτα στον αλγόριθμο. Είναι γενικώς επιθυμητό, το RVE να περιέχει όσο το δυνατόν περισσότερους κόκκους, ώστε να υπάρχουν περισσότερες δυνατές ανταλλαγές προσανατολισμών.

Στην παρούσα Διπλωματική Εργασία, αναδείχθηκε η σημασία του αριθμού βημάτων και της ανάλυσης, όπου οι τιμές και των δύο, εξαρτώνται εν πολλοίς από την αρχική διαφορά των πειραματικών και κατανομών Mackenzie. Ωστόσο, δεν μελετήθηκε η επίδραση διαφορετικών Συναρτήσεων και Πλάτος Καμπύλης Πυρήνα.

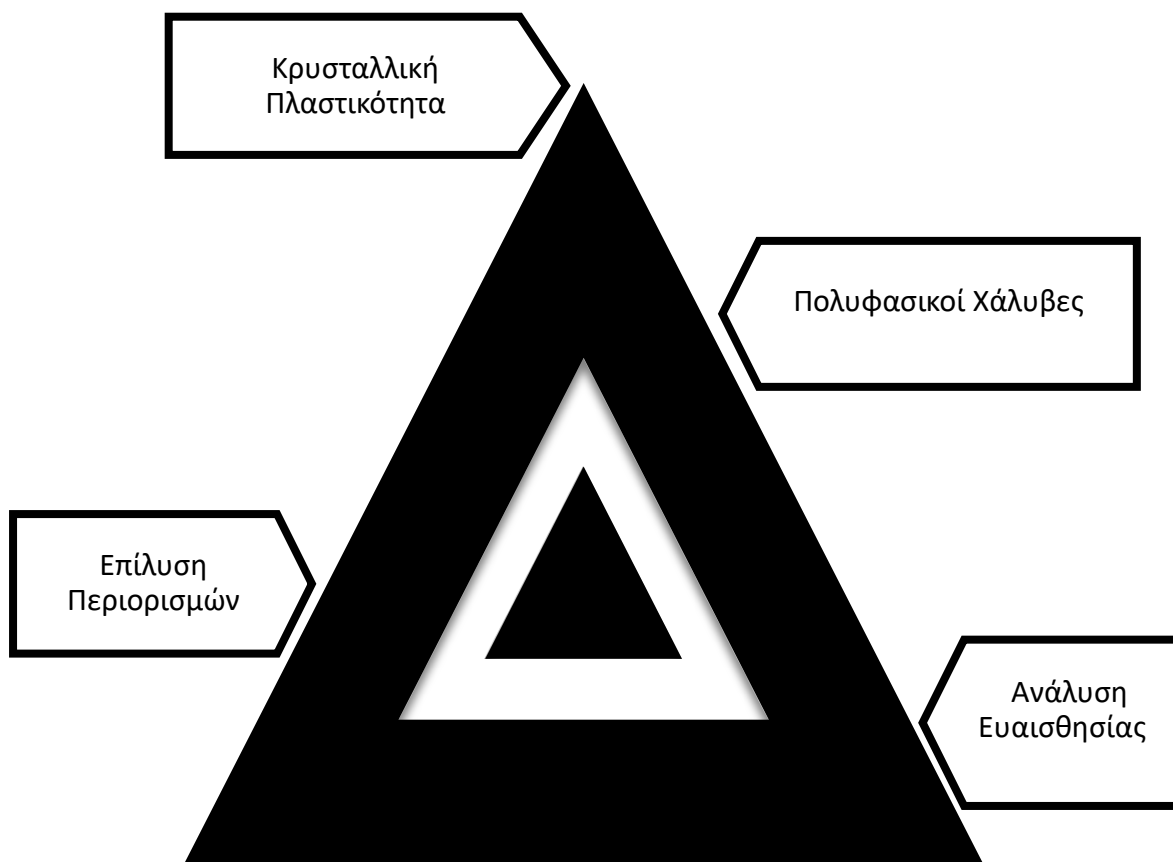
Παρά τα επιτυχή αποτελέσματα, αξίζει να αναφερθεί ότι η δυνατότητα βελτιστοποίησης της MDF στο λογισμικό DRAGen, είναι ακόμα σε αρχικό στάδιο ανάπτυξης, καθώς, επί του παρόντος, υπάρχουν περιορισμοί στην εφαρμογή της μεθόδου:

- Η βελτιστοποίηση είναι δυνατή μόνο σε μονοφασικά υλικά
- Στην Μέθοδο 2, η διακριτοποίηση του κελιού Mackenzie δεν ήταν δυνατή λόγω τεχνικών δυσκολιών που υφίστανται στην αναπαράσταση της συγκεκριμένης γεωμετρίας σε υπολογιστικό περιβάλλον. Λύση μπορεί να δόθηκε με την διακριτοποίηση του 1/8 του χώρου RF, ωστόσο αυτή έρχεται με υπολογιστικό κόστος. Λόγω της ιδιότητας του χώρου RF να εμπεριέχει όλες τις διαφορές προσανατολισμού στο κελί Mackenzie, το οποίο αποτελεί το 1/8 του κυβοειδούς που διακριτοποιείται, η εκτίμηση κατανομής πιθανότητας με την μέθοδο των πυρήνων επιβαρύνεται με παραπάνω υπολογισμούς, σε θέσεις όπου δεν υπάρχουν διαφορές προσανατολισμού.

- Οι κατανομές διαφορών προσανατολισμού υπολογίστηκαν με βάση το αριθμητικό κλάσμα των ορίων και όχι με το κλάσμα εμβαδού αυτών.

## 6. Μελλοντική Έρευνα

Η προτεινόμενη ερευνητική πορεία για την εξέλιξη της δυνατότητας βελτιστοποίησης της MDF στο λογισμικό DRAGen, ακολουθεί μια μορφή πυραμίδας, στην βάση της οποίας βρίσκεται η συγκεκριμένη Διπλωματική Εργασία. Επόμενο βήμα, θα πρέπει να αποτελεί μια λεπτομερή ανάλυση ευαισθησίας όλων των παραμέτρων, και να μελετηθεί η επίδραση διαφορετικών συναρτήσεων και πλάτος καμπύλης πυρήνα. Μετέπειτα, θα πρέπει να ξεπεραστούν οι περιορισμοί που παρουσιάστηκαν στην εξέλιξη της Εργασίας, καθώς και επέκταση της δυνατότητας σε πολυφασικούς χάλυβες. Τέλος, στην κορυφή της πυραμίδας, να γίνει το επόμενο βήμα και να δοκιμαστεί η δυνατότητα αυτή, στο τελικό της στάδιο ανάπτυξη, σε προσομοιώσεις Κρυσταλλικής Πλαστικότητας (Crystal Plasticity), για φαινόμενα πχ. κόπωσης ή ερπυσμού.



Σχήμα 6: Σχηματική αναπαράσταση μελλοντικών ερευνητικών προτάσεων

## 7. Αναφορές

- [1] Y. Zhang και J. Yang, «CALPHAD-based alloy design of cast austenitic heat-resistant steels with enhanced strength at 1000 °C,» *Calphad*, December 2019, <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2019.101679>.
- [2] A. Baganis, M. Bouzouni και S. Papaefthymiou, «Phase Field Simulation of AA6XXX Aluminium Alloys Heat Treatment,» *Metals, MDPI*, February 2021, 10.3390/met11020241.
- [3] W. Wang και W. Wen, «Modelling in Crystal Plasticity: From Theory to Application,» *Encyclopedia of Materials: Metals and Alloys*, 2022, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819726-4.00058-2>.
- [4] M. Henrich, F. Pütz και S. Münstermann, «A Novel Approach to Discrete Representative Volume Element Automation and Generation-DRAGen,» *Materials, MDPI*, 17 April 2020.
- [5] I. Gitman, H. Askes και L. Sluys, «Representative volume: Existence and size determination,» *Engineering Fracture Mechanics*, November 2007, <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2006.12.021>.
- [6] F. Azhari, W. Davids, H. Chen, S. P. Ringer, C. Wallbrink, Z. Sterjovski, B. R. Crawford, D. Agius, C. H. Wang και G. Schaffer, «A Comparison of Statistically Equivalent and Realistic Microstructural Representative Volume Elements for Crystal Plasticity,» *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 28 March 2022, <https://doi.org/10.1007/s40192-022-00257-4>.
- [7] «Scopus Search Elsevier,» [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic#basic>.
- [8] S. Kobayashi, M. Hirata, S. Tsurekawa και T. Watanabe, «Grain Boundary engineering for control of fatigue crack propagation in austenitic stainless steels,» *Engineering Procedia*, 2011.
- [9] C. Das, S. Albert, K. Laha, J. Swaminathan, S. Ravi, A. Bhaduri, B. Murty και P. Mayr, «Influence of Coincidence Site Lattice Boundary on Creep Resistance of P91 Steel Weldments,» *Procedia Engineering*, 2014.
- [10] J. Gao, J. Tan, X. Wu και S. Xia, «Effect of grain boundary engineering on corrosion fatigue behavior of 316LN stainless steel in borated and lithiated high-temperature water,» *Corrosion Science*, 2019.
- [11] W. D. Callister και D. G. Rethwisch, *Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών*, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΤΖΙΟΛΑ, 2016.
- [12] H. K. D. H. Bhadeshia, *Geometry of Crystals, Polycrystals, and Phase Transformations*, Boca Raton : CRC Press, 2018.
- [13] H. Bunge, *Texture Analysis in Materials Science*, Helga & Hans-Piere Bunge, 1982.

- [14] L. Kestens και H. Pirgazi, «Texture Formation in metal alloys with cubic crystal structure,» *Materials Science and Technology* , 2016, doi: 10.1080/02670836.2016.1231746.
- [15] U. Kocks, C. Tome και H.-R. Wenk, *Texture and Anisotropy*, Cambridge: Press Syndicate of the University of Cambridge , 1999.
- [16] V. Randle και O. Engler, *Introduction to Texture Analysis*, CRC PRESS, 2000.
- [17] D. Raabe, «Overview on Basic Types of Hot Rolling Textures of Steels,» σε *Steel Research International*, 2003, doi: <https://doi.org/10.1002/srin.200300194>.
- [18] Φ. Τσιώλης, Διπλωματική Εργασία "Χαρακτηρισμός και προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής και κρυσταλλογραφικού ιστού κατά την θερμομηχανική επεξεργασία του AA3104", Αθήνα : ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ, 2021.
- [19] Y. He, S. Goder και J. J. Jonas, «Representation of misorientations in Rodrigues-Frank space: application to the Bain, Kurdjumov-Sachs, Nishiyama-Wassermann and Pitsch orientation relationships in the Gibeon meteorite,» *Acta Materilia*, 24 December 2004.
- [20] V. Randle, «Representation of Grain Misorientations (Mesotexture) in Rodrigues-Frank Space,» *Proceedings: Mathematical and Physical Sciences*, 8 October 1990.
- [21] P. Neumann , «Representation of Orientations of Symmetrical Objects by Rodrigues Vectors,» *Textures and Microstructures*, 1991.
- [22] L. Kestens, K. Verbeken, R. Decoquer, R. Petrov, P. Governado και S. E. Offerman, «The Use of Rodrigues-Frank Space for Representing Discrete Misorientation Distributions,» *Materials Science Forum*, 15 September 2005, doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.495-497.157.
- [23] Y. He και J. J. Jonas, «Representation of orientation relationships in Rodrigues-Frank space for any two classes of lattice,» *Applied Crystallography*, 18 March 2007.
- [24] K. Sztwiertnia, «The Misorientation Distribution Function,» *Texture and Microstructure*, January 1986, 10.1155/TSM.6.201.
- [25] Γ. Δ. Χρυσουλάκης και Δ. Ι. Παντελής , ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΤΩΝ ΜΕΤΑΛΛΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ, ΑΘΗΝΑ : Παπασωτηρίου , 2008.
- [26] Γ. Κ. Τριανταφυλλίδης , ΜΕΤΑΛΛΟΓΝΩΣΙΑ, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΤΖΙΟΛΑ, 2016.
- [27] A. Rollet και P. Kalu, «pajarito.materials.cmu.edu,» 2009. [Ηλεκτρονικό]. Available: <http://pajarito.materials.cmu.edu/>. [Πρόσβαση 4 April 2023].
- [28] Γ. Ν. Χαϊδεμενόπουλος, ΦΥΣΙΚΗ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑ-2η Έκδοση, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΤΖΙΟΛΑ, 2020.
- [29] Μ. Πετροπούλου, Εκτιμητής πυκνότητας πιθανότητας με την μέθοδο των πυρήνων, Αθήνα: ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ, 2011.
- [30] J. Mackenzie και M. Thomson , «Some Statistics Associated with the Random Disorientation of Cubes,» *Biometrika*, 1957, <https://doi.org/10.2307/2333253> .
- [31] J. Mackenzie, «Second Paper on Statistics Associated with the Random Disorientation of Cubes,» *Biometrika*, 1958, <https://doi.org/10.2307/2333059> .



- [32] S. Onaka, «Arrangements of three to six cubes with maximum disorientation angles,» *Taylor & Francis*, 02 March 2020, 10.1080/14786435.2020.1733695.
- [33] H. Beladi, «The Distribution of Grain Boundary Planes in Interstitial Free Steel,» *Metallurgical and Materials Transactions A*, September 2012, DOI: 10.1007/s11661-012-1393-0.
- [34] V. Radle , «The coincidence site lattice and the ‘sigma enigma’,» *Materials Characterization*, 14 February 2002, .
- [35] M. Laleh, A. E. Hughes, M. Y. Tan, G. S. Rohrer, S. Primig και N. Haghdadi, «Grain boundary character distribution in an additively manufactured austenitic stainless steel,» *Scripta Materilia*, 17 October 2020, <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2020.10.018>.
- [36] A. P. Sutton και V. Vitke, «ON THE STRUCTURE OF TILT GRAIN BOUNDARIES IN CUBIC METALS III. GENERALIZATIONS OF THE STRUCTURAL STUDY AND IMPLICATION FOR THE PROPERTIES OF GRAIN BOUNDARIES,» *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 17 March 1983, <http://www.jstor.org/stable/37436>.
- [37] W. Wang, Y. Lin, P. Dai, G. S. Rohrer και W. Zhang, «Grain boundary plane distributions in a cold rolled and annealed high purity iron,» *Materials Characterization*, 20 October 2016, <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2016.10.021>.
- [38] X. Zhong, D. J. Rowenhorst, H. Beladi και G. S. Rohrer, «The five-parameter grain boundary curvature distribution in an austenitic and ferritic steel,» *Acta Materialia*, 24 October 2016, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.10.030>.
- [39] G. S. Rohrer, D. M. Saylor, B. El Dasser, B. L. Adams, A. D. Rollet και P. Wynbatt, «The distribution of internal interfaces in polycrystals,» *Zeitschrift für Metallkunde*, April 2004, 10.3139/146.017934.
- [40] C. Tong , *Introduction to Materials for Advanced Energy Systems*, Springer, 2019, <https://doi.org/10.1007/978-3-319-98002-7>.
- [41] H. -. T. Liu, J. Schneider, A. Stocker, A. Franke, F. Gao, H. -. Y. Song, Z. -. Y. Liu, R. Kawall και G. -. D. Wang, «Microstructure and Texture Evolution in Non-oriented Electrical Steels Along Novel Strip Casting Route and Conventional Route,» *Steel Research International*, 2 May 2016, doi: <https://doi.org/10.1002/srin.201500145>.
- [42] L. Z. An , Y. -. p. Wang, H. -. Y. Song, G. -. D. Wang και H. -. T. Liu, «Improving magnetic properties of non - oriented electrical steels by controlling grain size prior to cold rolling,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1 December 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165636>.
- [43] J. Salinas-Beltrán, A. Salinas-Rodríguez, E. Gutiérrez-Castañeda και R. Deaquino Lara, «Effects of processing conditions on the final microstructure and magnetic properties in non-oriented electrical steels,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 15 May 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.01.017>.
- [44] J. Barros, T. Ros-Yañez, L. Vandenbossche, L. Dupré, J. Melkebeek και Y. Houbaert, «The effect of Si and Al concentration gradients on the mechanical and magnetic properties of electrical steel,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, April 2005, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.547>.

- [45] Y. He και E. J. Hilinski, «Texture and magnetic properties of non-oriented electrical steels processed by an unconventional cold rolling scheme,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 18 December 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.12.057>.
- [46] M. -. T. Jamil, A. Benabou, S. Clénet, S. Shihab, L. -. L. B. Arbenz και J. -. C. Mipo, «Magnetic ageing investigation of bulk low - carbon silicon steel,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1 June 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.167761>.
- [47] M. Holscher, D. Raabe και K. Lucke, «Rolling and recrystallization textures of bcc steels,» *Steel Research*, December 1991, <https://doi.org/10.1002/srin.199100451>.
- [48] L. -. Z. An, Y. -. P. Wang, G. -. D. Wang και H. -. T. Liu, «Comparative study on microstructure and texture evolution of low silicon non - oriented electrical steels along one - stage and two - stage cold rolling processes,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 1 February 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170358>.
- [49] F. Pütz, M. Henrich, N. Fehlemann, A. Roth και S. Münstermann, «Generating Input Data for Microstructure Modelling: A Deep Learning Approach Using Generative Adversarial Networks,» *Materials*, MDPI, 23 September 2020.
- [50] Y. Staraselski, A. Brahme, R. K. Misra και K. Inal, «Reconstruction of the 3D representative volume element from the generalized two-point correlation function,» *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17 December 2014.
- [51] M. Miodownik, A. Godfrey, E. Holm και D. Hughes, «ON BOUNDARY MISORIENTATION DISTRIBUTION FUNCTIONS AND HOW TO INCORPORATE THEM INTO THREE-DIMENSIONAL MODELS OF MICROSTRUCTURAL EVOLUTION,» *Acta Materialia*, 1999.
- [52] N. Singh, L.-M. Brownie και R. Butler, «Parallel astronomical data processing with Python: Recipes for multicore machines,» *Astronomy and Computing*, August 2013, <https://doi.org/10.1016/j.ascom.2013.04.002>.
- [53] S. Grablo, «Mypdh.engineer,» MYPDH, LLC, 26 March 2020. [Ηλεκτρονικό]. Available: <https://mypdh.engineer/courses/structure-of-metals/>. [Πρόσβαση 28 May 2023].
- [54] K. Wang, W. Zhang, J. Xu και W. Dan, «The impact of misorientation on the grain boundary energy in bi-crystal copper: an atomistic simulation study,» *Journal of Molecular Modeling*, 26 January 2022, <https://doi.org/10.1007/s00894-022-05037-7>.
- [55] A. P. Sutton και R. W. Balluffi, *Interfaces in Crystalline Materials*, Oxford: Clarendon Press, 1997.
- [56] J. K. Mason και C. Schuh, «The generalized Mackenzie distribution: Disorientation,» *Acta Materialia*, 1 July 2009.
- [57] M. A. Tschopp, S. P. Coleman και D. L. McDowell, «Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals),» *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 2015, 10.1186/s40192-015-0040-1.
- [58] H. Foll, «uni-kiel.de,» [Ηλεκτρονικό]. Available: [https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/iss/kap\\_5/advanced/a5\\_3\\_1.html](https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/iss/kap_5/advanced/a5_3_1.html). [Πρόσβαση 14 May 2023].

- [59] S. Kobayashi, S. Ogou και S. Tsurekawa, «Grain Boundary Engineering for Control of Fatigue Fracture in 316L Austenitic Stainless Steel,» *Materials Transactions*, 2018, <https://doi.org/10.2320/matertrans.MB201804>.
- [60] S. Kobayashi, M. Hirata, S. Tsurekawa και T. Watanabe, «Grain boundary engineering for control of fatigue crack propagation in austenitic stainless steel,» *Procedia Engineering*, 2011.

## 8. Παράρτημα

### 8.1 Πίνακες Πράξεων Συμμετρίας Κυβικού Συστήματος (Cubic Crystal System Symmetry Operations Matrices)

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

23

432

Εξίσωση 26: Πίνακες Πράξεων Συμμετρίας Κυβικού Συστήματος [15].

## 8.2 Πλέγματα Ταυτόσημων Θέσεων (Coincidence Site Lattices, CSLs)

Πίνακας 13: Πίνακας Πλεγμάτων Ταυτόσημων Θέσεων [27].

Σ	θ (°)	[uvw]	Γωνίες Euler (φ <sub>1</sub> , Φ, φ <sub>2</sub> )			Διανύσματα Rodriguez-Frank			Τετραδόνια			
			φ <sub>1</sub>	Φ	φ <sub>2</sub>	g <sub>1</sub>	g <sub>2</sub>	g <sub>3</sub>	g <sub>1</sub>	g <sub>2</sub>	g <sub>3</sub>	g <sub>4</sub>
3	60	111	45	70.53	45	1/3	1/3	1/3	0.288	0.288	0.288	0.866
5	36.86	100	0	90	36.86	1/3	0.0	0.0	0.000	0.000	0.316	0.948
7	38.21	111	26.56	73.4	63.44	0.2	0.2	0.2	0.188	0.188	0.188	0.944
9	38.94	110	26.56	83.62	26.56	0.25	0.25	0.0	0.000	0.236	0.236	0.943
11	50.47	110	33.68	79.53	33.68	1/3	1/3	0.0	0.000	0.302	0.302	0.904
13a	22.62	100	0	90	22.62	0.2	0.0	0.0	0.000	0.000	0.196	0.981
13b	27.79	111	18.43	76.66	71.57	0.143	0.143	0.143	0.139	0.139	0.139	0.971
15	48.19	210	19.65	82.33	42.27	0.4	0.2	0.0	0.000	0.183	0.365	0.913
17a	28.07	100	0	90	28.07	0.25	0.0	0.0	0.000	0.000	0.243	0.970
17b	61.9	221	45	86.63	45	0.4	0.4	0.2	0.171	0.343	0.343	0.858
19a	26.53	110	18.44	89.68	18.44	1/6	1/6	0.0	0.000	0.162	0.162	0.973
19b	46.8	111	33.69	71.59	56.31	0.25	0.25	0.25	0.229	0.229	0.229	0.918
21a	21.78	111	14.03	79.02	75.97	1/9	1/9	1/9	0.109	0.109	0.109	0.982
21b	44.41	211	22.83	79.02	50.91	1/3	1/6	1/6	0.154	0.154	0.308	0.926

23	40.45	311	15.25	82.51	52.13	1/3	1/9	1/9	0.104	0.104	0.313	0.938
25a	16.26	100	0	90	16.26	0.143	0.0	0.0	0.000	0.000	0.142	0.99
25b	51.68	331	36.87	90	53.13	1/3	1/3	1/9	0.100	0.300	0.300	0.9
27a	31.59	110	21.8	85.75	21.8	0.2	0.2	0.0	0.000	0.193	0.193	0.962
27b	35.43	210	15.07	85.75	31.33	0.285	0.143	0.0	0.000	0.136	0.272	0.953
29a	43.6	100	0	90	43.6	0.4	0.0	0.0	0.000	0.000	0.393	0.928
29b	46.4	221	33.69	84.06	56.31	0.286	0.286	0.143	0.131	0.263	0.263	0.919
31a	17.9	111	11.31	80.72	78.69	1/11	1/11	1/11	0.09	0.09	0.09	0.988
31b	52.2	211	27.41	78.84	43.66	0.4	0.2	0.2	0.180	0.18	0.359	0.898
33a	20.1	110	12.34	83.04	58.73	0.125	0.125	0.000	0.000	0.123	0.123	0.985
33b	33.6	311	37.51	76.84	37.51	0.273	0.091	0.091	0.087	0.087	0.261	0.957

### 8.3 Ευρετήριο Εικόνων

Εικόνα 1: Διάγραμμα ρυθμού ερπυσμού συναρτήσει το λόγου ορίου CSL/συνολικά όρια (CSL Fraction) για χάλυβα P91 [9].....	5
Εικόνα 1: Σχέση μεταξύ των συστημάτων αναφοράς κρυστάλλου και δοκιμίου για φύλλο έλασης [5].....	6
Εικόνα 2: Στερεογραφικές προβολές πολυκρυσταλλικού υλικών 500 κρυστάλλων: τυχαία προσανατολισμένου (αριστερά), με ύπαρξη κρυσταλλογραφικού ιστού (δεξιά) [1]. .....	7
Εικόνα 3: Σχηματική αναπαράσταση περιστροφής εκφρασμένης ως ζευγάρι γωνίας/άξονα [4] .....	9
Εικόνα 4: Γραφική αναπαράσταση του κατά Bunge υπολογισμού των γωνιών Euler [2].....	11
Εικόνα 5: Τρισδιάστατη απεικόνιση χαρακτηριστικών ιών και κρυσταλλογραφικών συστατικών στον χώρο του Euler [3].. .....	12
Εικόνα 7: Συνάρτηση κατανομής προσανατολισμών φύλλου έλασης χάλυβα με: (a) ισαξονικό φερρίτη, (b) βελονοειδή φερρίτη (c) μαρτενσίτη για $\phi_2=45^\circ$ [14].....	13
Εικόνα 7: Θεμελιώδης Ζώνη κυβικής συμμετρίας με απεικόνιση σημαντικών σημείων εντός αυτής.....	15
Εικόνα 8: Προσανατολισμοί με άξονα περιστροφής (111) (αριστερά) και προσανατολισμοί της $\gamma$ -fibre (δεξιά) (Με κόκκινο, η αρχή του χώρου Rodriguez-Frank). .....	16
Εικόνα 9: Αποδόμηση Θεμελιώδους Ζώνης κυβικής συμμετρίας σε κυβοειδή και πυραμιδοειδή [5]. .....	16
Εικόνα 11: Ο κυλινδρικός χώρος γωνίας-άξονα [16].....	17
Εικόνα 12: Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού δοκίμιο νικελίου κυκλικής φόρτισης, στον κυκλινδρικό χώρο γωνίας/άξονα [16]. .....	18
Εικόνα 12: Σχηματική αναπαράσταση ορίων κόκκων [44].....	19
Εικόνα 13: Σχηματική αναπαράσταση βασικής αρχής για τον υπολογισμό της Διαφοράς Προσανατολισμού (Misorientation) δύο κυβικών κρυστάλλων [17].....	19
Εικόνα 15: Εξέλιξη διεπιφανειακής ενέργειας σε σχέση με την γωνία διαφοράς προσανατολισμού [12]. .....	20
Εικόνα 16: Κατανομή γωνιών (πάνω) και αξόνων (κάτω) διαφοράς προσανατολισμού για $f(\Gamma)=1$ [30, 31].....	23
Εικόνα 16: Διάγραμμα κατανομής γωνιών διαφοράς προσανατολισμού σε χάλυβα AM 316L (as-built), με στεογραφήματα άξονων διαφοράς προσανατολισμού σε διαστήματα γωνιών [25]. .....	23
Εικόνα 18: MDF στον χώρο του Euler για κυκλικά παραμορφωμένο (cyclically deform) δοκίμιο νικελίου a) σε τμήματα με σταθερή την $\phi_2$ , b) σε τμήματα με σταθερή την $\Phi$ [16].	24
Εικόνα 18: Κελί Mackenzie που χρησιμοποιείται για την προβολή κατανομών διαφορών προσανατολισμού: εντός της Θεμελιώδους Ζώνης του χώρου Rodriguez-Frank (αριστερά), ανεξάρτητη προβολή, πάνω στην οποία σημειώνονται και οι άξονες διαφοράς προσανατολισμού που περικλύουν το κελί (δεξιά). .....	25
Εικόνα 20: Κατανομή διαφορών προσανατολισμού του τρισδιάστατου κελιού Mackenzie της Θεμελιώδους Ζώνης του χώρου Rodriguez-Frank για ψυχρά ελασμένο και θερμικά κατεργασμένο χάλυβα IF. Οι αριθμοί κάτω από τα τμήματα δηλώνουν την τιμή του $\Gamma_3$ το οποίο παραμένει σταθερό σε κάθε τμήμα [33].....	25
Εικόνα 20: Κατανομή διεπιφανειακής ενέργειας συναρτήσει της γωνίας διαφοράς προσανατολισμού σε χαλκό [45].....	26
Εικόνα 22: Περιστροφή του κίτρινου πλέγματος κατά $36.9^\circ \langle 100 \rangle$ σε σχέση με το άσπρο πλέγμα. Με μαύρο, σημειώνονται οι πλεγματικές θέσεις οι οποίες βρίσκονται σε ταύτιση μετά την περιστροφή, ενώ με κόκκινο (b), όσες δεν βρίσκονται σε ταύτιση [12].....	26
Εικόνα 23: Πλήρης ανάλυση περιστροφής δύο πλεγμάτων με το μοντέλο του πλέγματος ταυτόσημων πλεγματικών θέσεων (CSL) για όριο Σ5 [28]. .....	27
Εικόνα 24: Ανάλυση ορίου Σ5 (αριστερά) και σχηματική αναπαράσταση τελικής μορφής ορίου (δεξιά) [46]. .....	28
Εικόνα 25: Σχηματική αναπαράσταση επικλινούς ορίου (tilt boundary,πάνω) και ορίου στροφής twist boundary, (κάτω) .....	28

Εικόνα 26: Σχηματική αναπαράσταση ενός ορίου κόκκου, με σημειωμένο το επίπεδο ορίου [49].	28
Εικόνα 27: Κατανομές επιπέδων ορίων κόκκων σε στερογραφική προβολή πόλου (001) για ψυχρά ελασμένο υψηλής καθαρότητας σίδηρομε ποσοστό ελάτωσης πάχους 87 μετά από θερμική κατεργασία στους 620 οC για α) 15 min β) 45 min [37].	29
Εικόνα 28: Υπολογισμός σφαιρικών συντεταγμένων διεύθυνσης κάθετης στο επίπεδο του ορίου κόκκου [29].	29
Εικόνα 29: Ανάλυση Κατανομής Χαρακτήρα Ορίου Κόκκου (Grain Boundary Character Distribution) για χάλυβα AM 316L (as-built) για διαφορές προσανατολισμού 60°/[111] (Σ3) και 38.9/[110] [37].	30
Εικόνα 29: Διάγραμμα φάσεων ισορροπίας συστήματος Fe-Si [42].	30
Εικόνα 30: Ολκιμότητα (πάνω) , σημείο διαρροής και μέγιστη εφελκυστική αντοχή (κάτω) συναρτήσει του wt. % Si και Al [34].	31
Εικόνα 32: Μικρογραφία Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (S.E.M.) ανακρυσταλλωμένου ηλεκτρικού χάλυβα [31].	31
Εικόνα 31: Εξέλιξη Συνάρτησης Κατανομής Προσανατολισμών κατά τα στάδια μεταποίησης (As - received= Φύλλο ψυχρής έλασης, (c)-(d): χρόνοι τελικής θερμικής κατεργασίας) [42].	32
Εικόνα 33: Συγκριτικά διαγράμματα κατανομής όγκου κόκκου μεταξύ πειραματικών και δεδομένων RVE [39].	34
Εικόνα 35: Διαγράμματα συσχέτισης μεταξύ των δεδομένων εισόδου [49].	34
Εικόνα 36: Συσχετίσεις πειραματικών (δεξιά) και εξαγμένων δεδομένων από τον αλγόριθμο WGAN (δεξιά) [49].	35
Εικόνα 36: Σαρώσεις Περίθλασης Οπισθοσκεδαζόμενων Ηλεκτρονικών (E.B.S.D.) του φερριτικού (α.) και ηλεκτρικού χάλυβα, που χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία των αρχείων δεδομένων εισόδου, για κάθε περίπτωση.	37
Εικόνα 38: Υπολογισμός σφάλματος Συναρτήσεων Κατανομής Γωνιών Προσανατολισμού πειραματικών και δεδομένων μετά την ανταλλαγή προσανατολισμών δύο κόκκων του RVE (Μέθοδος 2).	40



## 8.4 Ευρετήριο Εξισώσεων

Εξίσωση 1: Μαθηματική έκφρασης προσανατολισμού κόκκου [15, 16].	7
Εξίσωση 2: Πίνακας Περιστροφής ή Προσανατολισμού [14].	8
Εξίσωση 3: Πίνακας Προσανατολισμού συναρτήσει της γωνίας περιστροφής των αξόνων x, y και z [16].	8
Εξίσωση 4: Υπολογισμός προσανατολισμού συναρτήσει της κρυσταλλικής συμμετρίας [16].	8
Εξίσωση 5: Υπολογισμός γωνίας περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού [15, 16].	9
Εξίσωση 6: Υπολογισμός δεικτών Miller ( $r_1, r_2, r_3$ ) άξονα περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού [15, 16].	9
Εξίσωση 7: Υπολογισμός δεικτών Miller ( $r_1, r_2, r_3$ ) άξονα περιστροφής από τα στοιχεία του Πίνακα Προσανατολισμού, για $\theta=0^\circ$ και $\theta=180^\circ$ [15, 16].	10
Εξίσωση 8: Υπολογισμός Πίνακα Προσανατολισμού μέσω του ζευγαριού γωνίας/άξονα. ...	10
Εξίσωση 9: Πίνακας Προσανατολισμού εκφρασμένου σε γωνίες Euler [12, 13, 15, 16].	12
Εξίσωση 10: Περιοδικότητα γωνιών Euler [13, 18].	12
Εξίσωση 11: Πεδίο ορισμού γωνιών Euler [13, 18].	12
Εξίσωση 12: Συνάρτηση κατανομής προσανατολισμών [16].	12
Εξίσωση 13: Υπολογισμός στοιχείων διανύσματος Rodriguez για δεδομένη γωνία και άξονα περιστροφής για $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ [16].	14
Εξίσωση 14: Μετατροπή σφαιρικών συντεταγμένων $\theta$ και $\psi$ , σε δείκτες Miller άξονα περιστροφής [16].	17
Εξίσωση 15: Μετατροπή ζευγαριού γωνίας/άξονα περιστροφής σε τετραδόνια (όπου $\theta, \eta$ γωνία περιστροφής και $r_n, o, n$ δείκτης Miller του άξονα περιστροφής) [15].	18
Εξίσωση 16: Υπολογισμός του Πίνακα Περιστροφής από τα στοιχεία του διανύσματος τετραδονίων [15].	18
Εξίσωση 17: Υπολογισμός Πίνακα Διαφοράς Προσανατολισμού [12, 15, 16].	19
Εξίσωση 18: Υπολογισμός Πίνακα Διαφοράς Προσανατολισμού, συναρτήσει της κρυσταλλικής συμμετρίας των κρυστάλλων A και B [15, 16, 27].	20
Εξίσωση 19: Υπολογισμός Πιθανότητας μιας διαφοράς προσανατολισμού να βρίσκεται εντός συγκεκριμένου διαστήματος $d\Omega$ .	21
Εξίσωση 20: Υπολογισμός της MDF, με ανάπτυξη γενικευμένων σφαιρικών αρμονικών συναρτήσεων [13, 24].	21
Εξίσωση 21: Υπολογισμός της MDF, με εκτίμηση της κατανομής πυκνότητας πιθανότητας με την μέθοδο του πυρήνα για πολυμεταβλητές παρατηρήσεις (Kernel Density Estimation, KDE) [29].	21
Εξίσωση 22: Υπολογισμός όρου $d\Gamma(\theta, r)$ της Εξίσωση 19 [24].	21
Εξίσωση 23: Συνάρτηση Κατανομής Πυκνότητας Πιθανότητας γωνίας διαφοράς προσανατολισμού (Disorientation/Misorientation Angle Distribution Function [24].	21
Εξίσωση 24: Συνάρτηση Κατανομής Πυκνότητας Πιθανότητας άξονα διαφοράς προσανατολισμού (Misorientation Axis Distribution Function) [24].	22
Εξίσωση 25: Υπολογισμός σφάλματος Συναρτήσεων Κατανομής Γωνιών Προσανατολισμού πειραματικών και δεδομένων μετά την αναταλλαγή προσανατολισμών δύο κόκκων του RVE (Μέθοδος 1).	38
Εξίσωση 26: Πίνακες Πράξεων Συμμετρίας Κυβικού Συστήματος [15].	66

## 8.5 Ευρετήριο Πινάκων

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικές ίνες και κρυσταλλογραφικά συστατικά μετάλλων κυβικού συστήματος (BCC & FCC) [14, 17].....	13
Πίνακας 2: Σημαντικότερα σημεία στην Θεμελιώδη Ζώνη της κυβικής συμμετρίας, όπως αυτά φαίνονται στην Εικόνα 7 [15]. .....	15
Πίνακας 3: Ταξινόμηση δεδομένων σε μορφή αρχείου .csv για χρήση στο λογισμικό δημιουργίας sRVE DRAGen.....	33
Πίνακας 4: Παράμετροι και αποτελέσματα δημιουργίας RVE των δύο ποιτήτων χαλύβων. 36	
Πίνακας 5: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).....	43
Πίνακας 6: Τεχνικές παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).....	44
Πίνακας 7: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).....	46
Πίνακας 8: Τεχνικές παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).....	47
Πίνακας 9: Χαρακτηριστικά υπολογιστή cluster που χρησιμοποιήθηκε για την Μέθοδο 2. .	48
Πίνακας 10: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).....	49
Πίνακας 11: Επιλεγμένες παράμετροι αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).....	51
Πίνακας 12: Παράμετροι μεθόδου πυρήνων (Kernel Density Estimation) για τον υπολογισμό της ODF μέσω του λογισμικού DRAGen .....	54
Πίνακας 13: Πίνακας Πλεγμάτων Ταυτόσημων Θέσεων [27].....	67

## 8.6 Ευρετήριο Διαγραμμάτων

Διάγραμμα 1: Ποσοστό βιβλιογραφικών αναφορών που αφορούν την ανάλυση φαινομένων κόπωσης σε προσομοιώσεις κρυσταλλικής πλαστικότητας, ως προς το σύνολο το σύνολο των αναφορών για προσομοιώσεις CP [7].	4
Διάγραμμα 2: Κατανομές Γωνίας (α.) και Αξονα (β.) Διαφοράς Προσανατολισμού σε RVE, χωρίς παρεβάσεις βελτιστοποίησης, ανεξαρτήτως πειραματικών δεδομένων.	36
Διάγραμμα 3: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών και Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού για τα πειραματικά δεδομένα (α.β) και του μη βελτιστοποιημένου RVE (κατανομές Mackenzie) (c,d).	43
Διάγραμμα 4: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	44
Διάγραμμα 5: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσεως του βήματος αλγορίθμου (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	45
Διάγραμμα 6: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών και Αξόνων Διαφοράς Προσανατολισμού για τα πειραματικά δεδομένα (α.β) και του μη βελτιστοποιημένου RVE (κατανομές Mackenzie) (c,d).	46
Διάγραμμα 7: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	47
Διάγραμμα 8: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσεως του βήματος αλγορίθμου (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	48
Διάγραμμα 9: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	49
Διάγραμμα 10: (α) Πειραματική και (β) βελτιστοποιημένη Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού στον Κυλινδρικό Χώρο Γωνίας/Αξονα (Ηλεκτρικός Χάλυβας)	50
Διάγραμμα 11: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσεως του βήματος αλγορίθμου (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	51
Διάγραμμα 12: Διαγράμματα κατανομής Γωνιών (α, μπλε -> πειραματική, πορτοκαλί -> βελτιστοποιημένη), και Αξόνων (b,c) μετά το πέρας του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	52
Διάγραμμα 13: (α) Πειραματική και (β) βελτιστοποιημένη Συνάρτηση Κατανομής Διαφορών Προσανατολισμού στον Κυλινδρικό Χώρο Γωνίας/Αξονα (Φερριτικός Χάλυβας)	53
Διάγραμμα 14: Εξέλιξη σφάλματος συναρτήσεως του βήματος αλγορίθμου (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	53
Διάγραμμα 15: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	54
Διάγραμμα 16: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Ηλεκτρικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	55
Διάγραμμα 17: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 1).	55
Διάγραμμα 18: Διαγράμματα ODF πριν (α) και μετά (β) τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης (Φερριτικός Χάλυβας, Μέθοδος 2).	56
Διάγραμμα 19: Κατανομή μεγέθους κόκκου μεταξύ πειραματικών (μπλε) και δεδομένων RVE (κόκκινο) για τον ηλεκτρικό χάλυβα.	56
Διάγραμμα 20: Κατανομή μεγέθους κόκκου μεταξύ πειραματικών (μπλε) και δεδομένων RVE (κόκκινο) για τον φερριτικό χάλυβα.	57

## 8.7 Ευρετήριο Σχημάτων

Σχήμα 1: Παράδειγμα διακριτοποίησης του πεδίου δυνατών γωνιών διαφοράς προσανατολισμού σε 7 ίσα διαστήματα (Resolution=7).....	38
Σχήμα 2: Σχηματική αναπαράσταση μεθόδου Monte Carlo για την βελτιστοποίηση της Συνάρτησης Κατανομής Γωνιών Διαφοράς Προσανατολισμού μεταξύ πειραματικών και RVE δεδομένων .....	39
Σχήμα 3: Απλοποιημένο διάγραμμα ροής Μεθόδου 1 .....	40
Σχήμα 4: Βασική αρχή διακριτοποίησης του κυβοειδούς θετικών τιμών διανυσμάτων του χώρου RF. (α) Θέση κυβοειδούς στον χώρο RF, (β) Διακριτοποίηση του κυβοειδούς, με ανάλυση (Resolution)=3 (c) Δισδιάστατη τομή του διακριτοποιημένου κυβοειδούς για $r_3=0.41$	
Σχήμα 5: Σχηματική Αναπαράσταση Μεθόδου 2 (n= αριθμός λογικών πυρήνων συστήματος) .....	42
Σχήμα 6: Σχηματική αναπαράσταση μελλοντικών ερευνητικών προτάσεων .....	60