



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΕΤΑΛΛΕΙΟΛΟΓΩΝ - ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

Επίδραση Διαφορετικών Συνθηκών Φόρτισης στις Μηχανικές Ιδιότητες του Αλουμινίου με Χρήση Μεθόδων Πλαστικότητας Κρυστάλλου

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

ΙΩΑΝΝΗ ΔΑΛΕΖΙΟΥ

Επιβλέπων: Dr.-Ing. Σπυρίδων Παπαευσθυμίου
Αναπληρωτής Καθηγητής

Αθήνα, Ιούλιος 2023



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΕΤΑΛΛΕΙΟΛΟΓΩΝ - ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

**Επίδραση Διαφορετικών Συνθηκών
Φόρτισης στις Μηχανικές Ιδιότητες του
Αλουμινίου με Χρήση Μεθόδων
Πλαστικότητας Κρυστάλλου**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

ΙΩΑΝΝΗ ΔΑΛΕΖΙΟΥ

Επιβλέπων: Dr.-Ing. Σπυρίδων Παπαευσθυμίου
Αναπληρωτής Καθηγητής

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή στις 19 Ιουλίου 2023.

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

.....
Dr.-Ing. Σπυρίδων Παπαευσθυμίου
Αναπληρωτής Καθηγητής

.....
Άνθιμος Ξενίδης
Καθηγητής

.....
Δημήτριος Πάνιας
Καθηγητής

Αθήνα, Ιούλιος 2023



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΕΤΑΛΛΕΙΟΛΟΓΩΝ - ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

Copyright © - All rights reserved. Με την επιφύλαξη παντός δικαιώματος.

Ιωάννης Δαλέζιος, 2023.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα.

ΔΗΛΩΣΗ ΜΗ ΛΟΓΟΚΛΟΠΗΣ ΚΑΙ ΑΝΑΛΗΨΗΣ ΠΡΟΣΩΠΙΚΗΣ ΕΥΘΥΝΗΣ

Με πλήρη επίγνωση των συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων, δηλώνω ενυπογράφως ότι είμαι αποκλειστικός συγγραφέας της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας, για την ολοκλήρωση της οποίας κάθε βοήθεια είναι πλήρως αναγνωρισμένη και αναφέρεται λεπτομερώς στην εργασία αυτή. Έχω αναφέρει πλήρως και με σαφείς αναφορές, όλες τις πηγές χρήσης δεδομένων, απόψεων, θέσεων και προτάσεων, ιδεών και λεκτικών αναφορών, είτε κατά κυριολεξία είτε βάσει επιστημονικής παράφρασης. Αναλαμβάνω την προσωπική και ατομική ευθύνη ότι σε περίπτωση αποτυχίας στην υλοποίηση των ανωτέρω δηλωθέντων στοιχείων, είμαι υπόλογος έναντι λογοκλοπής, γεγονός που σημαίνει αποτυχία στην Διπλωματική μου Εργασία και κατά συνέπεια αποτυχία απόκτησης του Τίτλου Σπουδών, πέραν των λοιπών συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων. Δηλώνω, συνεπώς, ότι αυτή η Διπλωματική Εργασία προετοιμάστηκε και ολοκληρώθηκε από εμένα προσωπικά και αποκλειστικά και ότι, αναλαμβάνω πλήρως όλες τις συνέπειες του νόμου στην περίπτωση κατά την οποία αποδειχθεί, διαχρονικά, ότι η εργασία αυτή ή τμήμα της δεν μου ανήκει διότι είναι προϊόν λογοκλοπής άλλης πνευματικής ιδιοκτησίας.

(Υπογραφή)

.....
Ιωάννης Δαλέζιος

19 Ιουλίου 2023

Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετάται η προσομοίωση της μηχανικής απόκρισης του κράματος AA6063 υπό διάφορες συνθήκες φόρτισης κάνοντας χρήση της μεθόδου πλαστικότητας κρυστάλλου. Αρχικά, δημιουργήθηκε μια αντιπροσωπευτική τρισδιάστατη μικροδομή, χρησιμοποιώντας εξωτερικό πρόγραμμα, η οποία περιείχε την τυπική μορφολογία, ιστό και μέγεθος κόκκων του κράματος έπειτα από διέλαση. Έπειτα, το καταστατικό μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση, βασίζεται στις αρχές της μηχανικής συνεχούς μέσου και της πολλαπλασιαστικής ανάλυσης της βαθμίδας παραμόρφωσης σε ελαστικό και πλαστικό μέρος. Για το ελαστικό μέρος χρησιμοποιήθηκε ο γνωστός νόμος του Hooke, ενώ για το πλαστικό, ένα φυσικό μοντέλο βασισμένο σε εξισώσεις της θεωρίας των διαταραχών. Ορισμένες από τις παραμέτρους του μοντέλου αυτού βρέθηκαν βιβλιογραφικά, ενώ οι υπόλοιπες βελτιστοποιήθηκαν, ώστε να παρθούν καμπύλες τάσης - παραμόρφωσης, οι οποίες έχουν πολύ καλή συσχέτιση με πειραματικά δεδομένα του κράματος. Έχοντας βρει τις παραμέτρους αυτές, πραγματοποιήθηκαν περαιτέρω προσομοιώσεις για τη μελέτη της μηχανικής συμπεριφοράς του κράματος σε συνθήκες που είναι δύσκολο να μελετηθούν πειραματικά, όπως με διαφορετικούς ρυθμούς παραμόρφωσης και υπό περίπλοκες συνθήκες φόρτισης. Παράλληλα μελετήθηκε η επίδραση του κρυσταλλογραφικού ιστού στη μηχανική απόκριση σε δύο διαφορετικές διευθύνσεις και οπτικοποιήθηκε η εξέλιξή του. Τέλος, μελετήθηκε και η εξέλιξη της πυκνότητας των διαταραχών κατά τη φόρτιση, πληροφορίες οι οποίες συμβάλλουν στην καλύτερη κατανόηση της μηχανικής του συμπεριφοράς.

Λέξεις Κλειδιά

Μέθοδος πλαστικότητας κρυστάλλου, Κράματα αλουμίνιου, Κράμα AA6063, Μοντελοποίηση, Μηχανικές ιδιότητες, Κρυσταλλογραφικός ιστός

Abstract

The current Master's Thesis deals with the modeling of the mechanical response of AA6063 alloy under various loading conditions, using the crystal plasticity method. Initially, a representative volume element (RVE) of the microstructure was created, using a third - party program, which contained the typical morphology, texture and grain size of the alloy after the extrusion process. The constitutive model is based on the principle of continuum mechanics and the multiplicative decomposition of the deformation gradient into an elastic and plastic part. For the elastic part, the well-established Hooke's law was used and as for the plastic part, a dislocation density physics model was used to simulate the plastic deformation. The majority of the latter model's parameters were found in the literature, while the others were optimised to obtain stress - strain curves, which have excellent fit with experimental data of the alloy. After the determination of said parameters, further simulations were carried out to study the mechanical behaviour of the alloy under conditions, that are difficult to study experimentally, such as different strain rates and complex loading conditions. Furthermore, the influence of the crystallographic texture on the mechanical response under two loading directions was studied, while visualizing its evolution. Finally, the evolution of the dislocation density was also examined to further understand the mechanical behaviour during loading of this alloy.

Keywords

Crystal plasticity, Mechanical properties, Aluminium alloys, AA6063, Crystallographic texture, Modeling

Ευχαριστίες

Καταρχήν ευχαριστώ τον αναπληρωτή καθηγητή Dr.-Ing. Σπυρίδωνα Παπαευθυμίου για την ανάθεση του θέματος, την εμπιστοσύνη του στο πρόσωπό μου και για την επίβλεψη της διπλωματικής εργασίας. Επίσης, ευχαριστώ τον Υποψήφιο Διδάκτορα κ. Βασίλη Λουκαδάκη για την συνεργασία και την καθοδήγησή του. Ακόμα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα μέλη της ΕΛΚΕΜΕ ΑΕ και ιδιαίτερα τον Δρ. Αθανάσιο Βαζδιρβανίδη για τα πειραματικά δεδομένα, καθώς και για τις πολύτιμες συμβουλές και επισημάνσεις που μου παρείχε, καθώς και τον Φώτιο Τσιώλη για τις εποικοδομητικές συζητήσεις και επισημάνσεις. Ευχαριστώ τα μέλη της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής, τον Καθ. Α. Ξενίδη και τον Καθ. Δ. Πάνια για τον χρόνο, που αφιέρωσαν στη μελέτη της εργασίας μου και για τα εποικοδομητικά τους σχόλια. Τέλος, ευχαριστώ τους γονείς μου για την καθοδήγηση και την ηθική συμπαράσταση που μου προσέφεραν όλα αυτά τα χρόνια.

Αθήνα, Ιούλιος 2023

Ιωάννης Δαλιέζιος

Περιεχόμενα

Περίληψη	i
Abstract	iii
Ευχαριστίες	v
1 Εισαγωγή	1
2 Θεωρητικό Μέρος	3
2.1 Το Αλουμίνιο και τα Κράματά του	3
2.1.1 Γενικά Στοιχεία	3
2.1.2 Κράματα Αλουμινίου	3
2.1.2.1 Κράμα AA6063	4
2.2 Διαταραχές	8
2.2.1 Κίνηση των Διαταραχών	9
2.2.1.1 Ολίσθηση (Slip)	9
2.2.1.2 Σταυρολίσθηση (Cross-slip)	9
2.2.1.3 Αναρρίχηση (Climb)	10
2.2.2 Αλληλεπίδραση Διαταραχών	10
2.2.3 Πολλαπλασιασμός Διαταραχών	12
2.3 Μέθοδος Πλαστικότητας Κρυστάλλου	15
2.3.1 Αρχές Παραμόρφωσης Κρυστάλλου	15
2.3.2 Καταστατικοί Νόμοι	17
2.3.2.1 Ελαστική Απόκριση	18
2.3.2.2 Πλαστική Απόκριση	19
2.3.3 Φασματική Μέθοδος	20
2.3.4 Στοιχειώδης Αντιπροσωπευτικός Όγκος (RVE)	22

3 Υπολογιστικό Μέρος	23
3.1 Δημιουργία Αρχείων Εισόδου	23
3.1.1 Αρχείο Γεωμετρίας	23
3.1.2 Αρχείο Συνθηκών Φόρτισης	25
3.1.3 Αρχείο Παραμέτρων Υλικού	26
4 Αποτελέσματα Προσομοιώσεων	29
4.1 Προσομοίωση Μηχανικής Συμπεριφοράς σε Διαφορετικές Συνθήκες Φόρτισης	29
4.1.1 Σύγκριση με Πειραματικά Δεδομένα	30
4.1.2 Επίδραση Ρυθμού Παραμόρφωσης	31
4.1.3 Επίδραση Ανισοτροπίας	31
4.1.4 Περίπλοκες Συνθήκες Φόρτισης	33
4.1.5 Εξέλιξη Μικροδομής και Κρυσταλλογραφικού Ιστού	33
4.2 Προσομοίωση Εξέλιξης Πυκνότητας Διαταραχών	35
5 Συμπεράσματα	39
5.1 Προτάσεις για Περαιτέρω Έρευνα	40
5.2 Επίδραση στους Στόχους Βιώσιμης Ανάπτυξης	41
Παραρτήματα	43
Α΄ Συγκεντρωτικοί Πίνακες Τιμών Παραμέτρων Μοντέλου Πλαστικότητας Κρυστάλλου	45
Α.1 Παράμετροι Αλληλεπίδρασης Διαταραχών	45
Α.2 Βιβλιογραφικές Παράμετροι	46
Α.3 Εύρος Βιβλιογραφικών Παραμέτρων για Βελτιστοποίηση	46
Β΄ Υπολογιστικό Πακέτο Naper	47
Βιβλιογραφία	57

Κατάλογος Διαγραμμάτων

2.1	Η ανάλυση της βαθμίδας παραμόρφωσης σε πλαστικό και ελαστικό μέρος.	18
4.1	Σύγκριση καμπύλης προσομοίωσης με τα πειραματικά δεδομένα του κράματος AA6063.	30
4.2	Σύγκριση καμπύλων τάσης - παραμόρφωσης με διαφορετικούς ρυθμούς παραμόρφωσης.	31
4.3	Σύγκριση καμπύλης τάσης - παραμόρφωσης με διαφορετικές διευθύνσεις φόρτισης.	32
4.4	Σύγκριση καμπύλης τάσης - παραμόρφωσης με περίπλοκες συνθήκες φόρτισης.	33
4.5	Εξέλιξη της πυκνότητας των διαταραχών ακμής, κοχλία και των συνολικών διαταραχών κατά την παραμόρφωση.	36
4.6	Εξέλιξη πυκνότητας ακινητοποιημένων διαταραχών.	36
4.7	Εξέλιξη της πυκνότητας των γεωμετρικά απαραίτητων διαταραχών (GND) κατά την παραμόρφωση.	37

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Ψευδοδιμερές διάγραμμα φάσεων Al-Mg ₂ Si [16].	5
2.2	Τυπική εικόνα μικροδομής του κράματος AA6063 μαζί με τις κυριότερες φάσεις [17].	6
2.3	Τυπική εικόνα κρυσταλλογραφικού ιστού του κράματος AA6063 έπειτα από τη διέλαση [18].	7
2.4	Απεικόνιση διαταραχής (α) ακμής και (β) κοχλία.	8
2.5	Διαδικασία δημιουργίας ετεροβαθμίδας [23].	11
2.6	Ετεροβαθμίδες σε μια διαταραχή ακμής [23].	11
2.7	(α) Ιδιοβαθμίδες και (β) ετεροβαθμίδες σε διαταραχές ακμής [23].	12
2.8	Σχηματική απεικόνιση πηγής Frank - Read [23].	14
2.9	Διατμητική τάση τ στο επίπεδο ολίσθησης μονοκρυστάλλου κατά τον μονοαξονικό εφελκυσμό.	16
3.1	Αριστερά το RVE με χρήση του αλγορίθμου Voronoi και δεξιά το RVE με χρήση του Neper και τη μορφολογία graingrowth.	24
3.2	Τελική μορφή RVE του κράματος AA6063 σε μορφή εικόνας (αριστερά) και ψηφιοποιημένη (δεξιά).	25
3.3	Τομείς ODF αρχικού κρυσταλλογραφικού ιστού.	27
4.1	Εξέλιξη του κρυσταλλογραφικού ιστού κατά την φόρτιση παράλληλα στην διεύθυνση διέλασης.	34
4.2	Εξέλιξη του κρυσταλλογραφικού ιστού κατά την φόρτιση κάθετα στην διεύθυνση διέλασης.	34
4.3	Τομείς ODF κρυσταλλογραφικού ιστού μετά τον εφελκυσμό.	35
4.4	Οπτικοποίηση τοπικής κατανομής τάσης εντός του RVE.	37
5.1	Οι Στόχοι Βιώσιμης Ανάπτυξης με τους οποίους ευθυγραμμίζεται η εργασία.	42

Κατάλογος Πινάκων

2.1	Κατηγορίες κραμάτων αλουμινίου [10].	4
2.2	Τυπική σύσταση κράματος AA6063 [13].	5
2.3	Τύποι αλληλεπίδρασης μεταξύ των διαφορετικών συστημάτων ολίσθησης, όπου s: αλληλεπίδραση μεταξύ του ίδιου συστήματος ολίσθησης, cp: συνεπίπεδη αλληλεπίδραση, h: κλειδαριά Hirth, l: κλειδαριά Lomer-Cottrell, g: , cl: συγγραμμική αλληλεπίδραση.	13
A'.1	Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των διαφορετικών τύπων αλληλεπίδρασης διαταραχών.	45
A'.2	Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία. . .	46
A'.3	Συγκεντρωτικός πίνακας εύρους τιμών παραμέτρων για βελτιστοποίηση.	46

Κεφάλαιο **1**

Εισαγωγή

Η κατανόηση της μηχανικής συμπεριφοράς των μεταλλικών υλικών, σε επίπεδο κρυστάλλου, αποτελεί βασική προϋπόθεση για τον σχεδιασμό εξαρτημάτων υψηλής τεχνογνωσίας. Τα κράματα αλουμινίου, λόγω του καλού λόγου αντοχής προς βάρος, έχουν βρει ευρεία εφαρμογή στην αυτοκινητοβιομηχανία [1]. Πιο συγκεκριμένα, η σειρά 6xxx χρησιμοποιείται συχνά στην παραγωγή δομικών μερών για την παθητική ασφάλεια του οχήματος (crash box), καθώς λόγω του συστήματος κρυστάλλωσης του, μπορεί να απορροφήσει μεγάλα ποσά ενέργειας [2]. Συνεπώς, είναι σημαντικό να μελετηθεί η μηχανική τους συμπεριφορά υπό διαφορετικές συνθήκες φόρτισης.

Οι κλασικές πειραματικές τεχνικές είναι ο βασικότερος τρόπος για την μελέτη της συμπεριφοράς. Ωστόσο, είναι χρονοβόρες, ακριβές και συχνά αδυνατούν να προσφέρουν περισσότερες πληροφορίες για την εις βάθος κατανόηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στο μικροσκοπικό επίπεδο [3] [4]. Για τον λόγο αυτό αναπτύχθηκαν οι μέθοδοι προσομοίωσης της συμπεριφοράς των υλικών. Συγκεκριμένα, μοντέλα βασισμένα σε φυσικές εξισώσεις, π.χ. τα μοντέλα που εντάσσονται στην θεωρία πλαστικότητας κρυστάλλων και αξιοποιούν την θεωρία των διαταραχών, δίνουν τη δυνατότητα προσομοίωσης της μηχανικής συμπεριφοράς, μέσω διαφορετικών μηχανισμών παραμόρφωσης, όπως ολίσθησης διαταραχών, μετασχηματισμών φάσεων κ.α. Ως εκ τούτου λαμβάνοντας υπόψιν τα χαρακτηριστικά της μικροδομής (μέγεθος και σχήμα κόκκων, κατανομή φάσεων, κρυσταλλογραφικός ιστός, φυσικές παράμετροι κ.λπ.) δίνεται η δυνατότητα να μελετηθούν διαφορετικές συνθήκες φόρτισης, οι οποίες συχνά μπορεί να είναι αδύνατον ή εξαιρετικά δύσκολο να πραγματοποιηθούν πειραματικά, λαμβάνοντας έτσι μια πιο ολοκληρωμένη εικόνα της μηχανικής συμπεριφοράς του υλικού [5]. Παράλληλα, μέσω των προσομοιώσεων αυτών μπορούν

να αντληθούν και να επεξεργαστούν πληθώρα αριθμητικών δεδομένων, τα οποία με πειραματικές τεχνικές δεν θα ήταν εφικτό να αναλυθούν [4]. Τέλος, στην σύγχρονη παγκοσμιοποιημένη βιομηχανία, που η ποιότητα, η τιμή, ο χρόνος παραγωγής του τελικού προϊόντος και η συνολική κατανάλωση ενέργειας αποκτούν ολοένα και υψηλότερη σημασία, η προσομοίωση των συστημάτων και των κατεργασιών μπορεί να δώσει λύσεις που επηρεάζουν όλες αυτές τις πτυχές. Στην βιομηχανική παραγωγή, ο εξοπλισμός χαρακτηρίζεται από αυξημένο κόστος, οποιοδήποτε σφάλμα ή επανασχεδιασμός στην τεχνολογική διαδικασία παραγωγής κοστίζει σε χρόνο όσο και σε πόρους. Γι' αυτόν το λόγο η έγκαιρη πρόβλεψη της εξέλιξης διαφόρων φαινομένων, δίνει την δυνατότητα βελτιστοποίησης και πρόβλεψης τυχόν σφαλμάτων χωρίς την κατανάλωση σημαντικών ποσών ενέργειας και πόρων [6].

Η παρούσα εργασία έχει ως στόχο την προσομοίωση του κράματος AA6063 υπό διάφορες συνθήκες φόρτισης με χρήση των μεθόδων πλαστικότητας κρυστάλλου για την καλύτερη κατανόηση και γρηγορότερη πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς του κόνκρετου χρήση του υπολογιστικού πακέτου DAMASK (Düsseldorf Advanced Materials Simulation Kit) [7].

Η δομή της διπλωματικής αυτής εργασίας είναι η ακόλουθη. Αρχικά, το θεωρητικό μέρος χωρίζεται σε τρεις ενότητες. Στην πρώτη ενότητα περιγράφονται τα κύρια χαρακτηριστικά του κράματος AA6063. Στη δεύτερη ενότητα αναφέρεται η θεωρία των διαταραχών και τα διάφορα φαινόμενα που προκύπτουν από αυτές και τέλος, στην τρίτη ενότητα περιγράφεται η μέθοδος της πλαστικότητας κρυστάλλου καθώς και κάποια βασικά στοιχεία λειτουργίας της προσομοίωσης για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών κατά την παραμόρφωσή τους. Έπειτα, στο πειραματικό μέρος αναφέρεται το πως δημιουργήθηκαν τα αρχεία εισόδου (αρχική μικροδομή, οριακές συνθήκες φόρτισης και φυσικές παράμετροι συμπεριφοράς του κράματος). Στο τέταρτο κεφάλαιο, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων από τις διάφορες συνθήκες φόρτισης και στο πέμπτο κεφάλαιο αναφέρονται τα συμπεράσματα αυτής της εργασίας καθώς και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη.

Κεφάλαιο **2**

Θεωρητικό Μέρος

2.1 Το Αλουμίνιο και τα Κράματά του

2.1.1 Γενικά Στοιχεία

Το αλουμίνιο ή αργίλιο (Al) βρίσκεται στην IIIA ομάδα και 3η περίοδο του περιοδικού πίνακα. Η πυκνότητά του είναι 2.7 gr/cm^3 , πολύ χαμηλότερη από αυτήν των περισσότερων μετάλλων και κραμάτων. Ωστόσο, από μόνο του, το καθαρό αλουμίνιο δεν παρουσιάζει ελκυστικές μηχανικές ιδιότητες, έχοντας εφελκυστική αντοχή της τάξης των 10MPa. Η κατάλληλη κραμάτωση και κατεργασία του, βελτιώνει έως και δύο τάξεις μεγέθους τις μηχανικές του ιδιότητες, τοποθετώντας το στην κορυφή για ένα από τα πιο χρήσιμα βιομηχανικά κράματα της σύγχρονης εποχής [8].

2.1.2 Κράματα Αλουμινίου

Τα κράματα του αλουμινίου χαρακτηρίζονται από αντοχή στην διάβρωση, εξαιρετική επιδεκτικότητα σε κατεργασία, υψηλό λόγο αντοχής προς πυκνότητα, υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα. Αυτές οι ιδιότητες τα καθιστούν ιδιαίτερα ελκυστικά για πολλές βιομηχανίες όπως η αεροναυπηγική βιομηχανία, η αυτοκινητοβιομηχανία, ναυπηγική βιομηχανία, κατασκευαστών προφίλ αλουμινίου και η βιομηχανία καλωδίων. Το Aluminum Association χωρίζει τα κράματα αλουμινίου σε δύο μεγάλες κατηγορίες (κράματα διαμόρφωσης και κράματα χύτευσης) και σε 9 υποκατηγορίες με τετραψήφιο κώδικα, ανάλογα τα κύρια κραματικά τους στοιχεία. Το πρώτο ψηφίο του κώδικα (**Xxxx**) υποδηλώνει την κύρια κραματική προσθήκη, το δεύτερο (**xXxx**) υποδηλώνει τις τροποποιήσεις που πραγματοποιήθηκαν στο αρχικό κράμα,

ενώ τα δύο τελευταία (xxXX) επιλέγονται αυθαίρετα για τον διαχωρισμό του εκάστοτε κράματος [9].

Πίνακας 2.1: Κατηγορίες κραμάτων αλουμινίου [10] .

ΚΡΑΜΑΤΑ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗΣ		ΚΡΑΜΑΤΑ ΧΥΤΕΥΣΗΣ	
Σειρά	Κύριο Κραματικό Στοιχείο	Σειρά	Κύριο Κραματικό Στοιχείο
1xxx	Καθαρό Αλουμίνιο	1xx.x	Καθαρό Αλουμίνιο
2xxx	Χαλκός	2xx.x	Χαλκός
3xxx	Μαγγάνιο	3xx.x	Πυρίτιο και Χαλκός
4xxx	Πυρίτιο	4xx.x	Πυρίτιο
5xxx	Μαγνήσιο και Πυρίτιο	5xx.x	Μαγνήσιο
6xxx	Μαγνήσιο	7xx.x	Ψευδάργυρος
7xxx	Ψευδάργυρος	8xx.x	Κασσίτερος
8xxx	Άλλα Στοιχεία	9xx.x	Άλλα Στοιχεία

Τα κράματα διαμόρφωσης χωρίζονται επίσης και σε θερμικά και μη θερμικά κατεργάσιμα, ανάλογα με το αν είναι επιδεκτικά σε σκλήρυνση μέσω κατακρήμνισης. Έτσι πέρα από τις διάφορες σειρές αλουμινίου, μπορεί να επέλθει περαιτέρω βελτίωση των μηχανικών ιδιοτήτων με θερμική ή μηχανική επεξεργασία.

2.1.2.1 Κράμα AA6063

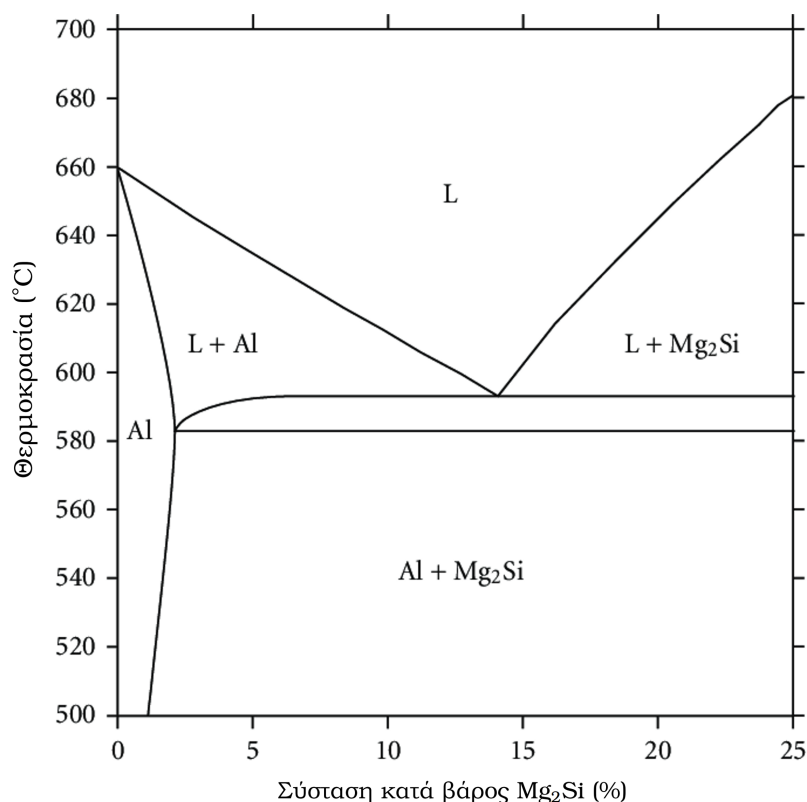
Η σειρά 6xxx των κραμάτων αλουμινίου αποτελείται από πυρίτιο και μαγνήσιο ως τα κύρια κραματικά στοιχεία όπως φαίνεται και στον πίνακα 2.1. Παρόλο που υστερούν σε αντοχή από τα αντίστοιχα κράματα των σειρών 2xxx και 7xxx, ξεχωρίζουν με την εξαιρετική επιδεκτικότητά τους σε διάφορες κατεργασίες [10]. Λόγω των παραπάνω χρησιμοποιούνται εκτενώς στον τομέα της αυτοκινητοβιομηχανίας [11], κυρίως ως προϊόντα διέλασης [12].

Τα κραματικά στοιχεία προσθήκης Si, Mg στο αλουμίνιο ισχυροποιούν το κράμα λόγω της διαφοράς ατομικής ακτίνας, εισάγοντας τάσεις στην κυψελίδα (στερεό διάλυμα). Ωστόσο, ο σημαντικότερος μηχανισμός ισχυροποίησης στα κράματα της σειράς 6xxx είναι αυτός της κατακρήμνισης. Η φάση ισχυροποίησης στα κράματα αυτά είναι η β -Mg₂Si.

Πίνακας 2.2: Τυπική σύσταση κράματος AA6063 [13].

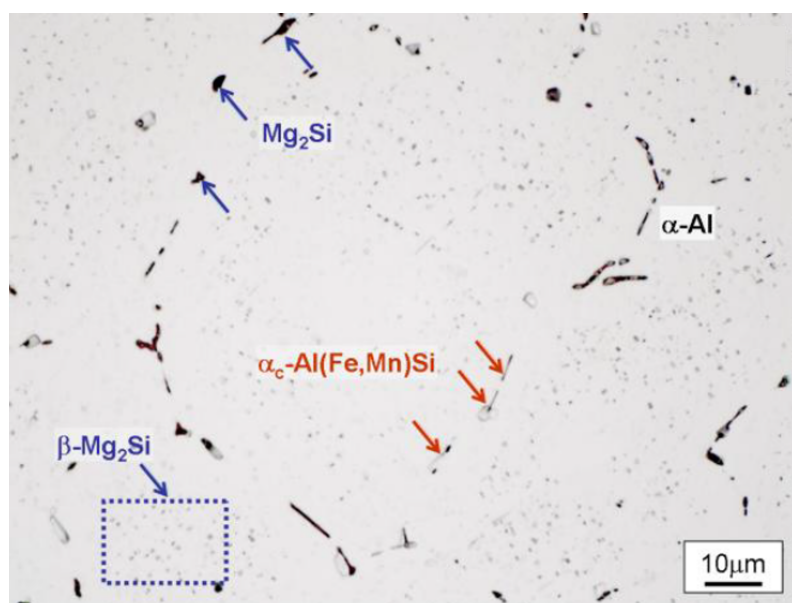
Στοιχείο	Si	Mg	Fe	Cu	Mn	Cr	Zn
Σύσταση	0.2-0.6	0.45-0.9	<0.35	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1

Τα κράματα αυτής της κατηγορίας περιέχουν μαγνήσιο (Mg) και πυρίτιο (Si) μέχρι 1.5% σε σύσταση αθροιστικά με αναλογία 1.73:1 για τη δημιουργία της φάσης πυριτιούχου μαγνησίου. Η κατακρήμνιση της φάσης αυτής, μέσω γήρανσης, επέρχεται αρχικά με τη δημιουργία των ζωνών Guinier - Preston (GP), οι οποίες εν συνεχεία δημιουργούν ένα πολύ λεπτοκρυσταλλικό κατακρήμνισμα [13]. Τα κατακρημνίσματα της φάσης Mg_2Si δημιουργούν ελαστικές παραμορφώσεις γύρω από το πλέγμα εισάγοντας τάσεις, οι οποίες αγκιστρώνουν και δυσχεραίνουν την κίνηση των διαταραχών, ενισχύοντας την αντοχή του κράματος [14]. Τα στάδια της κατακρήμνισης είναι τα ακόλουθα: Υπέρκορο Στερεό Διάλυμα \rightarrow GP ζώνες \rightarrow β'' \rightarrow β' \rightarrow β [15].

Σχήμα 2.1: Ψευδοδιμερές διάγραμμα φάσεων Al- Mg_2Si [16].

Για το κράμα AA6063 οι συνήθεις θερμικές κατεργασίες είναι οι T4, T6 και T7, οι οποίες αντιπροσωπεύουν αντίστοιχα και τα διαφορετικά επίπεδα γήρανσης (φυσική γήρανση, τεχνητή γήρανση και υπεργήρανση) [16]. Η θερμική κατεργασία των

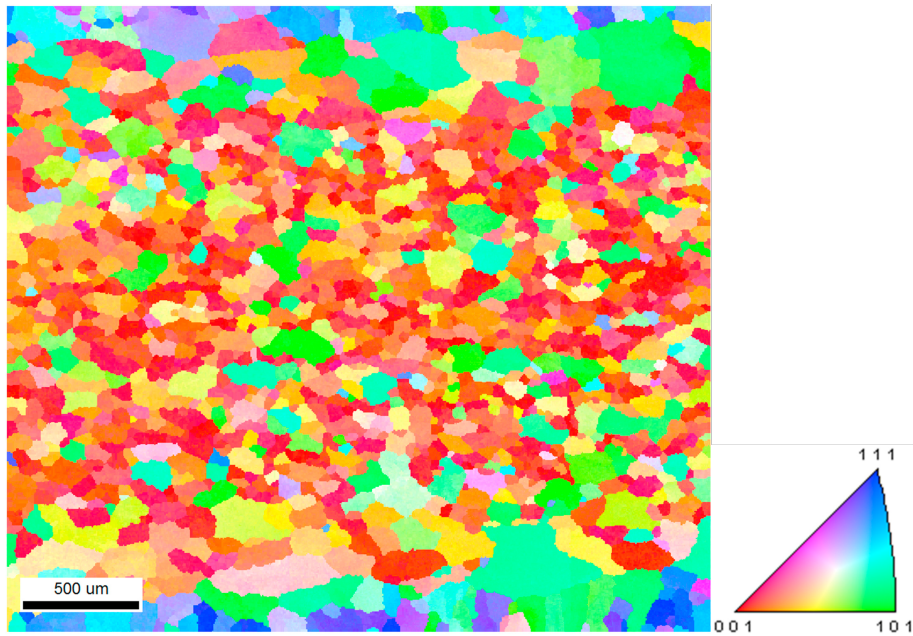
κραμάτων αυτών αποτελείται από διαλυτοποίηση σε υψηλές θερμοκρασίες (520 - 550 °C), έπειτα βαφή σε θερμοκρασία περιβάλλοντος για τη λήψη του υπέρκορου στερεού διαλύματος και στη συνέχεια φυσική γήρανση στη θερμοκρασία περιβάλλοντος (T4) ή τεχνητή γήρανση στους 160 - 180 °C για τη δημιουργία των φάσεων ισχυροποίησης. Οι μηχανικές ιδιότητες του κράματος AA6063 διαφέρουν ανάλογα με το χρόνο τεχνητής γήρανσης, αφού οι συνεκτικές φάσεις β'' και β' προσδίδουν τη μέγιστη αντοχή (T6), ενώ με υπεργήρανση και τη δημιουργία της μη συνεκτικής β φάσης (T7) η αντοχή ελαττώνεται πάλι [16].



Σχήμα 2.2: Τυπική εικόνα μικροδομής του κράματος AA6063 μαζί με τις κυριότερες φάσεις [17].

Στο Σχήμα 2.2 παρατηρείται η μητρική φάση του αλουμινίου, η φάση ισχυροποίησης Mg_2Si ως λεπτοκρυσταλλικό και ομογενώς διεσπαρμένο κατακρήμνισμα, καθώς και η ενδομεταλλική ένωση $Al(Fe,Mn)Si$, η οποία υποβαθμίζει τις μηχανικές ιδιότητες και δημιουργείται λόγω του ανεπιθύμητου σιδήρου στη σύσταση του κράματος. Η κατανομή των ανωτέρων φάσεων κυμαίνεται από 0.5 - 2 % για το Mg_2Si και από 1 - 2.5% για το $Al(Fe,Mn)Si$ [17].

Λόγω του ότι τα κράματα AA6063 μετά την χύτευση και την ομογενοποίησή τους, υφίστανται διέλαση για την δημιουργία προφίλ πριν την τελική επεξεργασία σε τελικό προϊόν, ένας προτιμητέος κρυσταλλογραφικός ιστός αναπτύσσεται κατά την κατεργασία τους. Ένας τυπικό ιστός για το κράμα αυτό αποτυπώνεται στο Σχήμα 2.3.

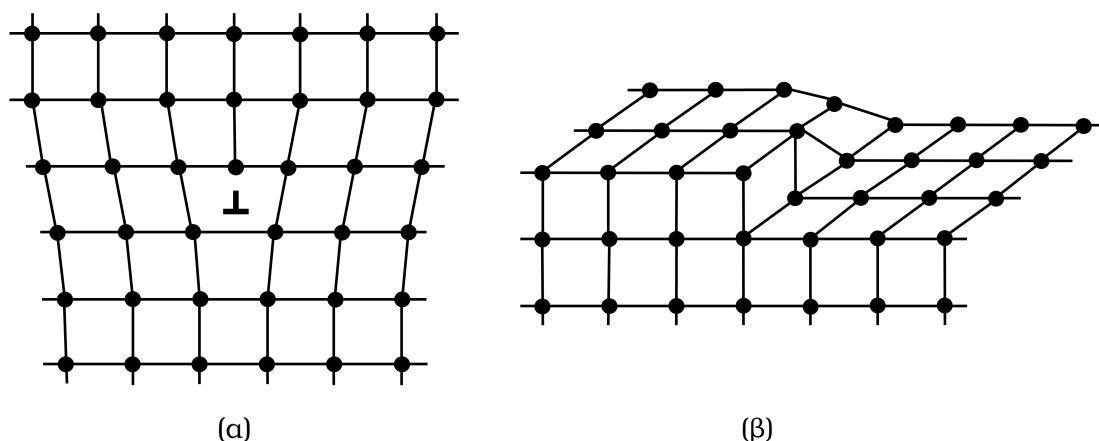


Σχήμα 2.3: Τυπική εικόνα κρυσταλλογραφικού ιστού του κράματος AA6063 έπειτα από τη διέλιξη [18].

2.2 Διαταραχές

Οι πρώτες έρευνες για τον θεωρητικό υπολογισμό της αντοχής των μεταλλικών υλικών κατέληξαν σε αρκετά υψηλότερες τιμές αντοχής σε σχέση με τις πειραματικά υπολογιζόμενες [19]. Η απόκλιση αυτή, εξηγήθηκε αργότερα με την θεωρία των διαταραχών. Μετά από μερικά χρόνια οι διαταραχές παρατηρήθηκαν και πειραματικά με την ανάπτυξη πιο ακριβών και τεχνολογικά προηγμένων μικροσκοπιών. Πλέον η ολίσθηση των διαταραχών (dislocation slip) στα μεταλλικά υλικά έχει αποδειχθεί ότι είναι ο κύριος μηχανισμός που οδηγεί στην πλαστική παραμόρφωσή τους [19].

Η διαταραχή μπορεί να οριστεί ως μια γραμμική ασυνέχεια στην κανονική κρυσταλλική δομή του μετάλλου, κατά την οποία μερικά από τα άτομα του πλέγματος βρίσκονται εκτός των κανονικών τους πλεγματικών θέσεων. Η κίνηση των διαταραχών εντός του κρυσταλλικού πλέγματος εξαιτίας μιας εξωτερικής μηχανικής φόρτισης, οδηγεί στην πλαστική παραμόρφωσή του. Για την μαθηματική περιγραφή των διαταραχών ορίζονται δύο διανύσματα. Το πρώτο διάνυσμα (s) καθορίζει την φορά της διαταραχής, ενώ το δεύτερο είναι το διάνυσμα Burgers (b) που καθορίζει την διεύθυνση και το μέγεθός της [20].



Σχήμα 2.4: Απεικόνιση διαταραχής (α) ακμής και (β) κοχλίας.

Υπάρχουν δύο είδη διαταραχών, οι διαταραχές ακμής (Σχήμα 2.4α και οι διαταραχές κοχλίας (Σχήμα 2.4β). Η ολίσθηση της διαταραχής ακμής πραγματοποιείται

παράλληλα στην διεύθυνση της εξωτερικής τάσης, ενώ η ολίσθηση της διαταραχής κοχλία πραγματοποιείται κάθετα αυτής. Με βάση τα διανύσματα που ορίστηκαν πριν, στις διαταραχές ακμής τα διανύσματα s και b είναι κάθετα μεταξύ τους, ενώ για τις διαταραχές κοχλία τα δύο αυτά διανύσματα είναι παράλληλα. Για μια μεικτή διαταραχή τα δύο αυτά διανύσματα κάνουν μια γωνία μεταξύ 0 και 90 μοιρών [20]. Ταυτόχρονα, στις διαταραχές αυτές μπορεί να οριστεί και ένα πρόσημο, ανάλογα τη φορά τους. Έτσι όταν εντός ενός κόκκου αναπτύσσεται μια βαθμίδα παραμόρφωσης, δημιουργείται ένα πλεόνασμα διαταραχών συγκεκριμένου προσήμου. Αυτό το πλεόνασμα διαταραχών περιγράφεται με τον όρο γεωμετρικά απαραίτητες διαταραχές (Geometrically Necessary Dislocations (GND)) [21] και έχει αποδειχθεί ότι παίζουν σημαντικό ρόλο στην πλαστική παραμόρφωση [22].

2.2.1 Κίνηση των Διαταραχών

2.2.1.1 Ολίσθηση (Slip)

Η μετακίνηση των διαταραχών στο επίπεδο που ορίζουν το διάνυσμα Burgers και το διάνυσμα της φοράς του ορίζει την ολίσθηση, η οποία είναι υπεύθυνη για την πλαστική παραμόρφωση των κρυσταλλικών υλικών. Αυτή η κίνηση μπορεί να περιγραφεί ως η σταδιακή μετακίνηση ενός επιπέδου ατόμων πάνω σε ένα άλλο. Περαιτέρω παραμόρφωση επέρχεται με επιπλέον μετακίνηση των επιπέδων αυτών ή με ενεργοποίηση νέων επιπέδων ολίσθησης. Όπως έχει αναφερθεί η τάση για να προκληθεί ολίσθηση είναι αρκετά μικρότερη από την θεωρητική αντοχή του κρυστάλλου [19]. Αυτή η τάση ονομάζεται κρίσιμη αναλυόμενη διατμητική τάση (Σχήμα 2.9) (τ_c) και εκφράζεται ως:

$$\tau_c = \frac{F_c}{A} \cos\phi \cdot \cos\lambda \quad (2.1)$$

2.2.1.2 Σταυρολίσθηση (Cross-slip)

Η φύση μιας διαταραχής κοχλία δεν περιορίζει την ολίσθησή της μόνο σε ένα κρυσταλλογραφικό επίπεδο. Συνεπώς αν μια τέτοια διαταραχή έλικά ολισθαίνει σε μια διεύθυνση ολίσθησης που περιέχει πάνω από ένα κρυσταλλογραφικά επίπεδα, αυτή κατά την ολίσθησή της μπορεί να αλλάξει επίπεδο ολίσθησης αν για κάποιον λόγο η κίνησή της παρεμποδιστεί [19], δεδομένου ότι και το άλλο επίπεδο περιέχει

την κατεύθυνση του διανύσματος Burgers [23]. Αυτή η διαδικασία αλλαγής επιπέδου ολίσθησης ονομάζεται σταυρολίσθηση και επιδρά σημαντικά στην πλαστική παραμόρφωση των μετάλλων, επειδή επιτρέπει την ολίσθηση των διαταραχών σε άλλα κρυσταλλογραφικά επίπεδα ακόμα και εάν συναντήσουν εμπόδια στην κίνησή τους [19].

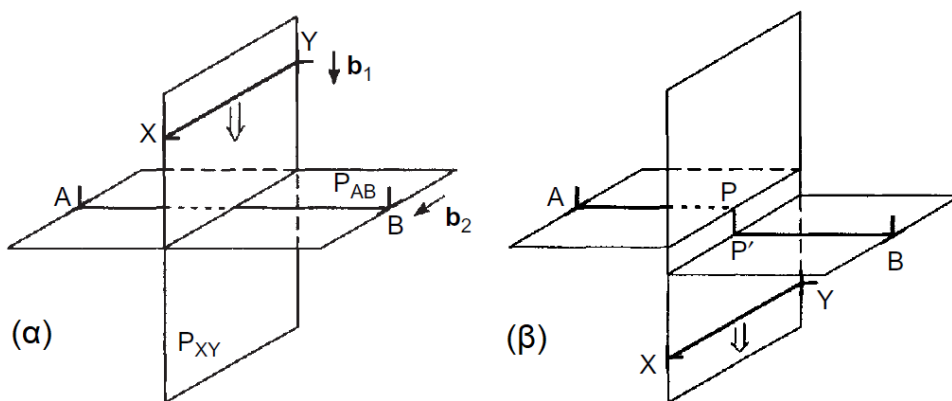
2.2.1.3 Αναρρίχηση (Climb)

Η κίνηση των διαταραχών ακμής περιορίζεται αποκλειστικά μόνο σε ένα κρυσταλλογραφικό επίπεδο, οπότε είναι αδύνατη η υπέρβαση ενός εμποδίου με σταυρολίσθηση. Σε υψηλές θερμοκρασίες, όπου ο μηχανισμός της διάχυσης ενισχύεται, οι διαταραχές ακμής μπορούν να μετακινηθούν σε άλλο κρυσταλλογραφικό επίπεδο μέσω της διαδικασίας της αναρρίχησης. Έτσι μέσω της διάχυσης μπορεί να γίνει μετακίνηση κενών πλεγματικών θέσεων προς την διαταραχή με αποτέλεσμα την προς τα επάνω μετακίνησή της (θετική αναρρίχηση) ή να γίνει διάχυση ατόμων παρεμβολής προς αυτήν και την προς τα κάτω μετακίνησή της (αρνητική αναρρίχηση) [19].

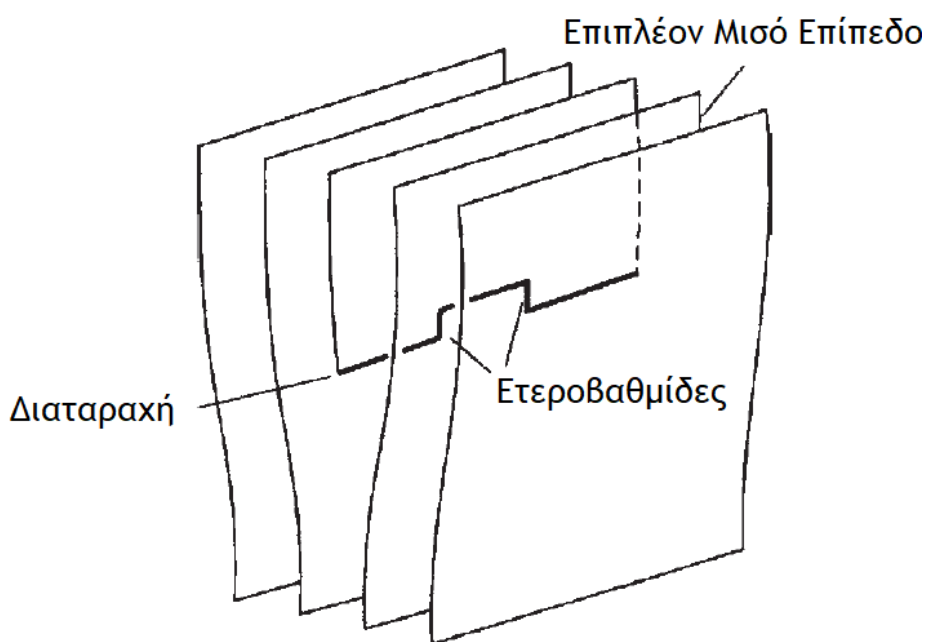
2.2.2 Αλληλεπίδραση Διαταραχών

Κατά την κίνηση τους στα επίπεδα ολίσθησης, οι διαταραχές μπορούν να διασταυρωθούν με διαταραχές κάθετες στο επίπεδο αυτό (δάσος διαταραχών), όπως στο Σχήμα 2.5. Η διασταύρωσή δύο διαταραχών με διανύσματα Burgers b_1 και b_2 προκαλεί μια βαθμίδα P'P με διάνυσμα Burgers b_2 , αλλά με μήκος ίσο με το μήκος του διανύσματος b_1 . Έτσι το συνολικό μήκος της διαταραχής AB αυξάνεται κατά b_1 . Το τμήμα P'P ονομάζεται ετεροβαθμίδα (jog) [23]. Ετεροβαθμίδες μπορούν επίσης να σχηματιστούν και κατά την αναρρίχηση τμήματος διαταραχής ακμής, όπως στο Σχήμα 2.6. Αντίστοιχα, βαθμίδες στο ίδιο επίπεδο ολίσθησης, όπως αυτές του Σχήματος 2.7, ονομάζονται ιδιοβαθμίδες (kink) και δεν εμποδίζουν την κίνηση των διαταραχών [23]. Πιο συγκεκριμένα, στους κρυστάλλους του FCC μπορεί να υπάρξουν και αντιδράσεις μεταξύ των διαταραχών που ευνοούν ή εμποδίζουν την περαιτέρω ολίσθησή τους. Οι αντιδράσεις αυτές σχηματίζονται με την αλληλεπίδραση διαταραχών των 12 διαφορετικών επιπέδων ολίσθησης.

Μία από τις σημαντικότερες αντιδράσεις διαταραχών στα πλέγματα FCC είναι η παρεμπόδιση Lomer (Lomer lock). Έστω ότι μια διαταραχή κινείται πάνω στο

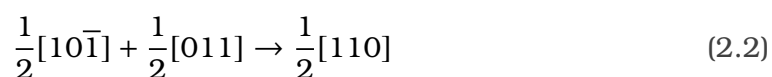


Σχήμα 2.5: Διαδικασία δημιουργίας ετεροβαθμίδας [23].

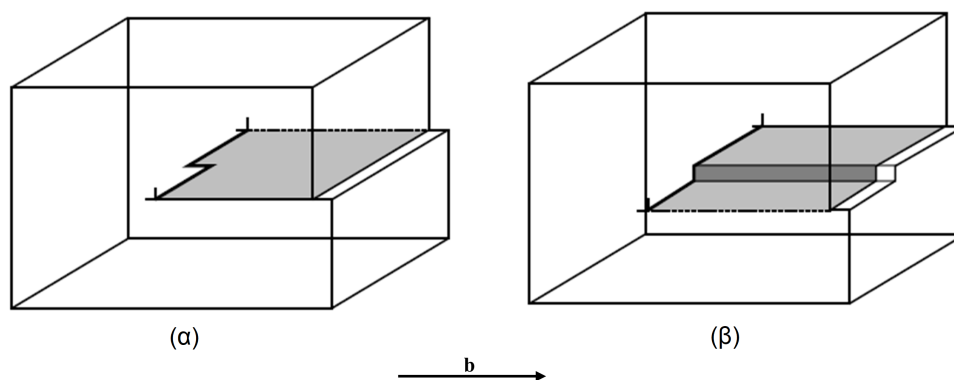


Σχήμα 2.6: Ετεροβαθμίδες σε μια διαταραχή ακμής [23].

επίπεδο $(1\ 1\ 1)$ με διάνυσμα Burgers $\frac{1}{2}[1\ 0\ \bar{1}]$, ενώ μια άλλη κινείται στο επίπεδο $(1\ 1\ \bar{1})$ με διάνυσμα Burgers $\frac{1}{2}[0\ 1\ 1]$. Όταν συναντηθούν δημιουργείται μια νέα διαταραχή ακμής σύμφωνα με την αντίδραση:



Η καινούρια διαταραχή που δημιουργείται έχει διάνυσμα Burgers $\frac{1}{2}[110]$ πάνω στην διεύθυνση $[1\ \bar{1}\ 0]$ με επίπεδο ολίσθησης το $(0\ 0\ 1)$. Το επίπεδο αυτό όμως δεν είναι πυκνό στα FCC, έτσι η ολίσθηση παρεμποδίζεται και η διαταραχή ακινητοποιείται.



Σχήμα 2.7: (α) Ιδιοθαθμίδες και (β) ετεροθαθμίδες σε διαταραχές ακμής [23].

Μια άλλη κοινή αντίδραση είναι αυτή της συγγραμμικής εξουδετέρωσης (collinear annihilation) κατά την οποία κάθετες μεταξύ τους διαταραχές με ίδιο διάνυσμα Burgers και αντίθετα διανύσματα φοράς (s), εξουδετερώνονται στο σημείο αντίδρασής τους. Αντίστοιχα, υφίστανται αντιδράσεις που δεν ακινητοποιούν τις διαταραχές, αλλά οδηγούν σε πολλαπλασιασμό τους (glissile junction). Στον παρακάτω πίνακα συνοψίζονται όλες οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των 12 διευθύνσεων ολίσθησης των κρυστάλλων FCC.

2.2.3 Πολλαπλασιασμός Διαταραχών

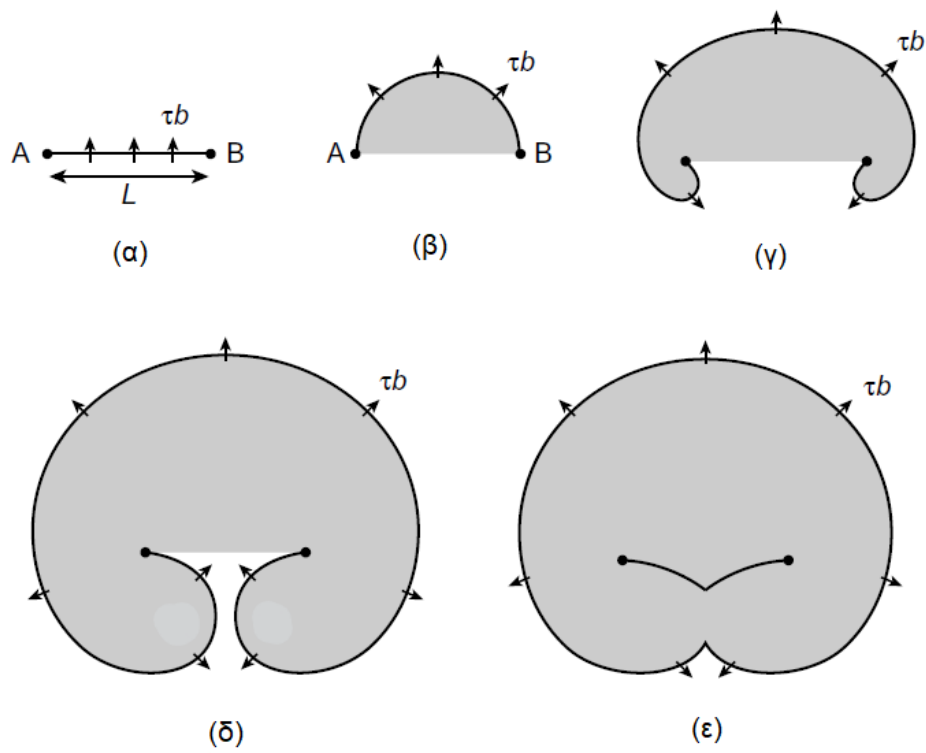
Συνήθως η πυκνότητα των διαταραχών σε ένα ανοπτημένο μέταλλο φτάνει την τάξη των 10^{10} m^{-2} (m/m^3). Ωστόσο, κατά την παραμόρφωσή τους η πυκνότητα των διαταραχών αυξάνεται και μπορεί να φτάσει ένα εύρος 10^{14} έως 10^{16} m^{-2} έπειτα από επιβολή φορτίου και πλαστική παραμόρφωση. Συνεπώς, κατά την παραμόρφωση όχι μόνο υπάρχει ολίσθηση των διαταραχών, αλλά και πολλαπλασιασμός τους. Μία από τις σημαντικότερες πηγές διαταραχών κατά την πλαστική παραμόρφωση είναι τα όρια κόκκων [23]. Τα όρια κόκκων, όπως και οι περιοχές γύρω από τα κατακρημνίσματα αποτελούν περιοχές απόκλισης από την τέλεια κρυσταλλογραφική δομή. Με αυτόν τον τρόπο, λειτουργούν ως θέσεις δημιουργίας διαταραχών υπό την εφαρμογή τάσεων [24]. Η σταυρολίσθηση και η αναρρίχηση δρουν κι αυτές ως πηγές διαταραχών και συμβάλλουν στον πολλαπλασιασμό των διαταραχών [23].

Ένας από τους πιο εδραιωμένους μηχανισμούς πολλαπλασιασμού των διαταραχών είναι μέσω της πηγής Frank-Read [19]. Όταν μια διαταραχή αγκιστρώνεται

Πίνακας 2.3: Τύποι αλληλεπίδρασης μεταξύ των διαφορετικών συστημάτων ολίσθησης, όπου *s*: αλληλεπίδραση μεταξύ του ίδιου συστήματος ολίσθησης, *cp*: συνεπίπεδη αλληλεπίδραση, *h*: κλειδαριά Hirth, *l*: κλειδαριά Lomer-Cottrell, *g*: , *cl*: συγγραμμική αλληλεπίδραση.

	$(111)[01\bar{1}]$	$(111)[\bar{1}01]$	$(111)[\bar{1}\bar{1}0]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[01\bar{1}]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}\bar{1}0]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[01\bar{1}]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}\bar{1}0]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[01\bar{1}]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}\bar{1}0]$
$(111)[01\bar{1}]$	s	cp	cp	h	l	g	cl	g	g	h	g	l
$(111)[\bar{1}01]$	cp	s	cp	l	h	g	g	h	l	g	cl	g
$(111)[\bar{1}\bar{1}0]$	cp	cp	s	g	g	cl	g	l	h	l	g	h
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[01\bar{1}]$	h	l	g	s	cp	cp	h	g	l	cl	g	g
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[101]$	l	h	g	cp	s	cp	g	cl	g	g	h	l
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}\bar{1}0]$	g	g	cl	cp	cp	s	l	g	h	g	l	h
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[0\bar{1}\bar{1}]$	cl	g	g	h	h	l	s	cp	cp	h	l	g
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}0\bar{1}]$	g	h	l	g	cl	g	cp	s	cp	l	h	g
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[110]$	g	l	h	l	g	h	cp	cp	s	g	g	cl
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$	h	g	l	cl	g	g	h	l	g	s	cp	cp
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[10\bar{1}]$	g	cl	g	g	h	l	l	h	g	cp	s	cp
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[\bar{1}\bar{1}0]$	l	g	h	g	l	h	g	g	cl	cp	cp	s

λόγω κάποιων εμποδίων (δάσος διαταραχών, ετεροβαθμίδες, κατακρημνίσματα) και της ασκηθεί διατμητική τάση, αυτή αρχίζει να καμπυλώνεται όπως στο Σχήμα 2.8. Όσο η τάση αυτή αυξάνεται, η ακτίνα καμπυλότητας της διαταραχής μειώνεται μέχρι να φτάσει στο σημείο (β) του Σχήματος 2.8, όπου η διαταραχή λαμβάνει ημικυκλικό σχήμα και η τάση την τιμή $\tau = \mu b/L$. Εν συνεχεία όταν πάει να σχηματιστεί βρόγχος τα δύο τμήματα της διαταραχής που συναντώνται εξουδετερώνονται, αφού έχουν ίδιο διάνυσμα Burgers και αντίθετο διάνυσμα φοράς *s*. Ο βρόγχος κλείνει και αρχίζει να επεκτείνεται με την εφαρμογή της τάσης, ενώ η διαταραχή παραμένει στο ευθύγραμμο τμήμα AB και ξεκινά από την αρχή η διαδικασία [23]. Έτσι η πηγή Frank-Read συνεχίζει να δημιουργεί καινούριες διαταραχές [19].



Σχήμα 2.8: Σχηματική απεικόνιση πηγής Frank - Read [23].

2.3 Μέθοδος Πλαστικότητας Κρυστάλλου

2.3.1 Αρχές Παραμόρφωσης Κρυστάλλου

Για την μοντελοποίηση της μηχανικής συμπεριφοράς των μεταλλικών υλικών και την αποτύπωση των μεταλλουργικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα κατά την παραμόρφωση τους, είναι απαραίτητη η ένταξη των ιδιοτήτων που προκύπτουν από την κρυσταλλική δομή στον σχηματισμό ενός εμπειριστατωμένου μοντέλου [25]. Η μέθοδος πλαστικότητας κρυστάλλου, η οποία βασίζεται στην συμπεριφορά του μονοκρυστάλλου, έχει επιτυχώς εφαρμοστεί για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς των πολυκρυσταλλικών υλικών [26][27][28]. Τα μοντέλα που βασίζονται σε αυτήν τη μέθοδο, συνυπολογίζουν την ελαστική και πλαστική συμπεριφορά των μεταλλικών υλικών, εκφράζοντας με τανυστές τους μηχανισμούς παραμόρφωσης. Τα δύο είδη μοντέλων που χρησιμοποιούνται με αυτήν τη μέθοδο είναι τα φαινομενολογικά και τα φυσικά. Η παρούσα εργασία ασχολείται με τον δεύτερο τύπο μοντέλων.

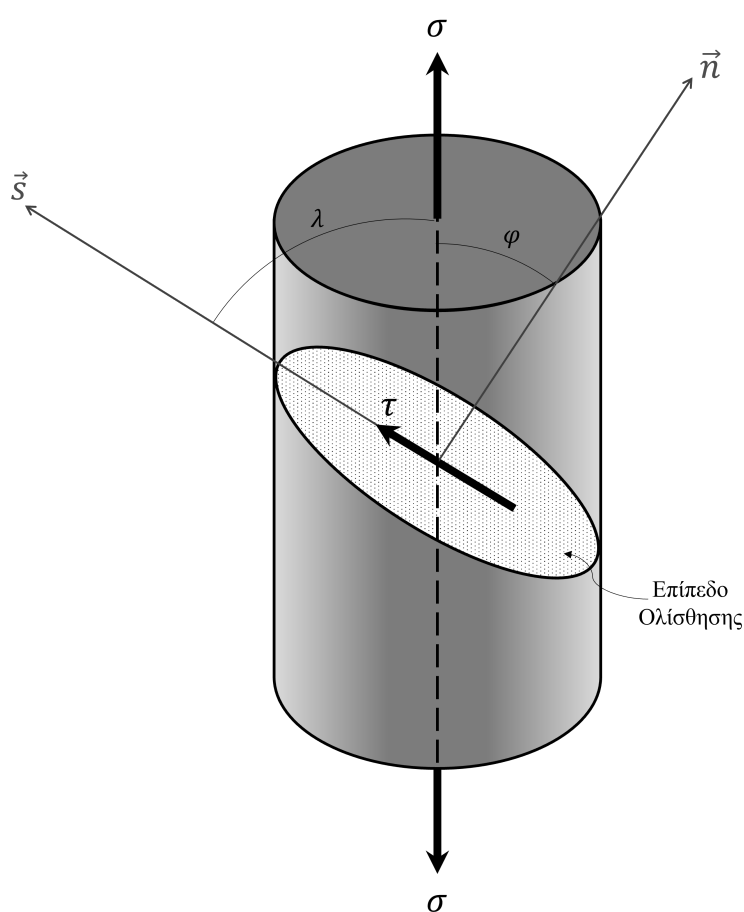
Τα φυσικά καταστατικά μοντέλα, αποτυπώνουν την κινηματική των διαφόρων τύπων σφαλμάτων της μικροδομής στις εξισώσεις τους, όπως την ολίσθηση των διαταραχών, τον πολλαπλασιασμό τους και την μη γραμμική αλληλεπίδρασή μεταξύ τους (Κεφάλαιο 2.2). Επιπλέον, η πλειονότητα των παραμέτρων των μοντέλων αυτών έχουν φυσική σημασία και δεν είναι απλώς μαθηματικές παράμετροι εκθετικών νόμων [25]. Αυτό έχει ένα ακόμα πλεονέκτημα ότι οι παράμετροι αυτές είναι ήδη γνωστές από φυσικά πειράματα.

Η μέθοδος της πλαστικότητας κρυστάλλου έχει τις βάσεις της στον νόμο του Schmid [25]. Σύμφωνα με αυτόν, κατά την επιβολή εξωτερικών τάσεων στον μονοκρυστάλλο, προκαλούνται διατμητικές συνιστώσες εντός αυτού, οι οποίες προκαλούν την ολίσθηση των διαταραχών σε συγκεκριμένα επίπεδα ολίσθησης που εξαρτώνται από το σύστημα κρυστάλλωσης. Αυτές οι αναλυόμενες τάσεις που ασκούνται στον κρυστάλλο, προκαλούν την ολίσθηση των διαταραχών και την παραμόρφωση όλου του κρυστάλλου παράλληλα στις προτιμητέες διευθύνσεις ολίσθησης. Συνεπώς για να επέλθει ολίσθηση στον κρυστάλλο, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.9, από απλό εφελκυσμό θα πρέπει η αναλυόμενη τάση, που δίνεται από την παρακάτω σχέση, να

γίνει μεγαλύτερη από μια κρίσιμη τάση

$$\tau_c = \sigma \cdot \cos\phi \cdot \cos\lambda \quad (2.3)$$

όπου τ είναι η διατμητική τάση του επιπέδου ολίσθησης, με κάθετο διάνυσμα \vec{n} στην διεύθυνση ολίσθησης s , σ είναι η ασκούμενη μονοαξονική τάση, λ είναι η γωνία που σχηματίζει η διεύθυνση ολίσθησης και ϕ η γωνία του επιπέδου ολίσθησης με τον άξονα εφελκυσμού. Το γινόμενο $\cos\phi \cdot \cos\lambda$ ορίζεται ως παράγοντας Schmid.



Σχήμα 2.9: Διατμητική τάση τ στο επίπεδο ολίσθησης μονοκρυστάλλινου κατά τον μονοαξονικό εφελκυσμό.

Μια σημαντική συνέπεια του νόμου του Schmid είναι ότι κατά την ολίσθηση πραγματοποιείται περιστροφή του κρυστάλλου, με αποτέλεσμα οι κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις των αξόνων να αλλάζουν σε σχέση με τον άξονα επιβολής της τάσης, γεγονός που οδηγεί στην ανάπτυξη κρυσταλλογραφικού ιστού σε πολυκρυσταλλικά υλικά. Ο νόμος του Schmid μπορεί να γενικευθεί σε έναν τρισδιάστατο χώρο λαμ-

βάνοντας υπ' όψιν και τις 9 συνιστώσες της τάσης, με σ_{11} , σ_{22} και σ_{33} να είναι οι ορθές τάσεις και $\sigma_{12} = \sigma_{21}$, $\sigma_{23} = \sigma_{32}$ και $\sigma_{13} = \sigma_{31}$ να είναι οι διατμητικές τάσεις. Έτσι προκύπτει ο γενικευμένος νόμος του Schmid:

$$\tau_r = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 I_{ni} I_{sj} \sigma_{ij} \quad (2.4)$$

όπου $I_{ni} = \hat{n} \cdot \hat{i}_i$ και $I_{sj} = \hat{s} \cdot \hat{j}_j$. Το μοντέλο αυτό βελτιώθηκε στη συνέχεια από τους Taylor [29] και Bishop - Hill [30].

2.3.2 Καταστατικοί Νόμοι

Η φύση της μεθόδου πλαστικότητας κρυστάλλου απαιτεί την χρήση λογισμικών πακέτων για την επίλυση των καταστατικών νόμων για κάθε κόκκο των πολυκρυσταλλικών υλικών. Έτσι τα τελευταία έτη με την άνοδο των υπολογιστικών μεθόδων έχουν αναπτυχθεί λογισμικά πακέτα από διάφορους φορείς για την επίλυση τους, όπως το DAMASK [7], του οποίου γίνεται χρήση και στην παρούσα εργασία, το PRISMS-Plasticity [31] και το Neper/FEPX project [32].

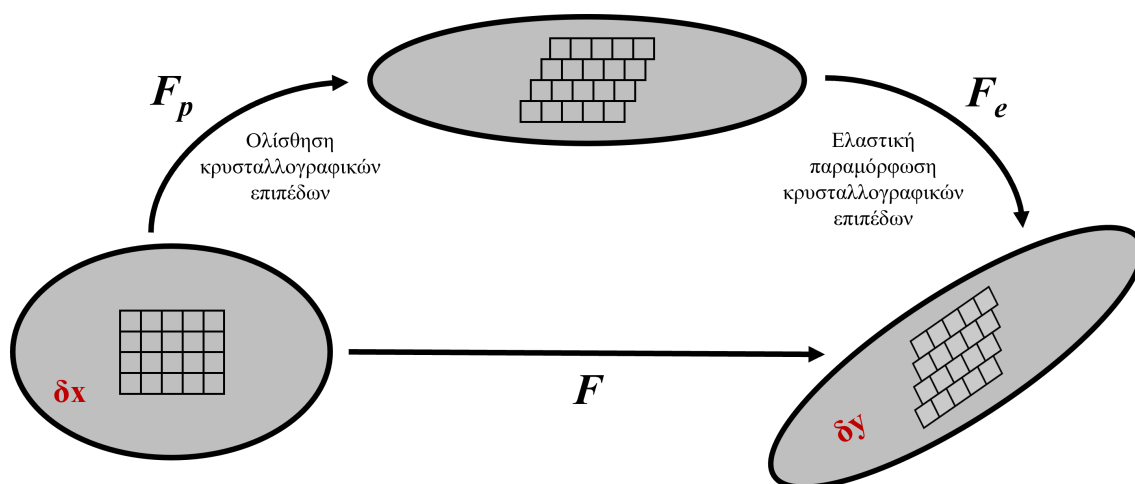
Οι καταστατικοί νόμοι αποτελούν τα θεμέλια κάθε προγράμματος προσομοίωσης. Μέσω των νόμων αυτών είναι δυνατή η περιγραφή της μηχανικής συμπεριφοράς κάθε στοιχείου. Κάθε καταστατικός νόμος χρειάζεται ένα δεδομένο σει παραμέτρων για να λειτουργήσει και να επιλυθεί με τις αναλυτικές μεθόδους. Οι παράμετροι του καταστατικού νόμου αντιπροσωπεύουν και τον βαθμό πολυπλοκότητας αυτού. Οι παράμετροι μπορεί να είναι καθαρά εμπειρικές προερχόμενες από προσεγγιστικές μεθόδους, ή προερχόμενες από περιγραφή φυσικών φαινομένων. Οι πρώτες πλεονεκτούν στην υπολογιστική ταχύτητα αλλά μειονεκτούν στην ακρίβεια ενώ οι δεύτερες το ανάποδο [25]. Σημαντικό, επίσης, πλεονέκτημα των φυσικά βασισμένων παραμέτρων είναι ότι μπορεί να υπολογιστούν και από προσομοιώσεις χαμηλότερης κλίμακας [7], κάτι που ενισχύει την διεπιστημονικότητα και την βαθύτερη κατανόηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα.

Κατά την μηχανική φόρτιση ενός υλικού, οι νόμοι που περιγράφουν την ελαστική και πλαστική απόκριση είναι αυτοί που θα προβλέψουν την μηχανική του απόκριση. Η μαθηματική αποτύπωση των νόμων αυτών επιτυγχάνεται μέσω των αρχών της μηχανικής του συνεχούς μέσου [33][34][21][35]. Η κινηματική συμπεριφορά ενός

στερεού σώματος από μια μη παραμορφωμένη σε μια παραμορφωμένη κατάσταση αλλάζει τις συντεταγμένες των στοιχείων του στερεού αυτού από x σε y . Έτσι ορίζεται η βαθμίδα παραμόρφωσης (deformation gradient) [33] $F = \partial y / \partial x$ (deformation gradient), η οποία είναι ξεχωριστή για κάθε σημείο του υλικού σώματος. Για τα μεταλλικά υλικά, των οποίων η παραμόρφωση περιγράφεται τόσο από ελαστικό όσο και από πλαστικό μέρος, είναι απαραίτητη η πολλαπλασιαστική ανάλυση της βαθμίδας παραμόρφωσης ως εξής:

$$F = F_e F_p \quad (2.5)$$

με F_e το ελαστικό μέρος και F_p το πλαστικό μέρος της παραμόρφωσης (Σχήμα 2.1).



Διάγραμμα 2.1: Η ανάλυση της βαθμίδας παραμόρφωσης σε πλαστικό και ελαστικό μέρος.

2.3.2.1 Ελαστική Απόκριση

Κατά την παραμόρφωση ενός μεταλλικού υλικού πρώτα επέρχεται η ελαστική του παραμόρφωση κατά την οποία οι αποστάσεις μεταξύ των ατόμων του υλικού αυξάνονται ή μειώνονται. Η ελαστική αυτή συμπεριφορά ακολουθεί μια γραμμική σχέση τάσης - παραμόρφωσης, η οποία περιγράφεται από τον νόμο του Hooke [36].

$$\sigma = C_{ij} \cdot \epsilon \quad (2.6)$$

όπου C_{ij} ο τανυστής τέταρτης τάξης που εμπεριέχει τα μέτρα ελαστικότητας των διαφορετικών διευθύνσεων, γνωστός και ως τανυστής ελαστικότητας. Λόγω συμμετρίας των τανυστών της τάσης και της παραμόρφωσης για τα κρυσταλλικά υλικά τα στοι-

χεία του τανυστή ελαστικότητας μειώνονται από 81 σε 21 (Εξίσωση 2.7) [36]. Πιο συγκεκριμένα, για τα κυβικά συστήματα οι ανεξάρτητες μεταβλητές ανέρχονται σε μόνο 3 [36]. Συνεπώς για το FCC ο τανυστής C_{ij} λαμβάνει την ακόλουθη μορφή [36]:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ \cdot & C_{11} & C_{12} & & & \\ \cdot & \cdot & C_{11} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{44} & \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

2.3.2.2 Πλαστική Απόκριση

Η θεωρία της πλαστικότητας ασχολείται με την αναντίστροφη και μόνιμη παραμόρφωση που επέρχεται σε ένα μεταλλικό υλικό έπειτα από δεδομένο φορτίο ή παραμόρφωση. Έτσι συμπληρώνει τη θεωρία της ελαστικότητας, η οποία περιγράφει την αντιστρεπτή συμπεριφορά των υλικών όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη παράγραφο μέχρι το όριο διαρροής [37]. Τα κυριότερα μοντέλα πλαστικής απόκρισης είναι τα φαινομενολογικά μοντέλα και τα βασισμένα στη φυσική της θεωρίας των διαταραχών. Στην διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκαν τα δεύτερα για την ανάλυση της πλαστικής παραμόρφωσης.

2.3.2.2.1 Μοντέλα Βασισμένα σε Φυσικές Εξισώσεις

Τα μοντέλα βασισμένα σε φυσικά φαινόμενα και μηχανισμούς έχουν τη δυνατότητα να δώσουν πιο ακριβή αποτελέσματα και να εφαρμοστούν σε μεγαλύτερο εύρος εφαρμογών [25][7]. Βασίζονται σε εσωτερικές μεταβλητές, όπως η πυκνότητα διαταραχών, οι οποίες έχουν φυσική σημασία και μπορούν να βρεθούν βιβλιογραφικά, υπολογιστικά ή πειραματικά [33]. Οι πρώτες προσπάθειες για την ανάπτυξη τέτοιων μοντέλων έγιναν από τους Kocks και Mecking [38]. Έτσι, βασιζόμενοι σε αυτούς οι Ma et al. [39][40][41] ανέπτυξαν ένα από τα πιο διαδεδομένα μοντέλα κρυσταλλικής πλαστικότητας βασισμένα στις διαταραχές, ενώ τελευταίες βελτιώσεις πραγματοποιήθηκαν και από τον Kords [34]. Η παρούσα διπλωματική εργασία

χρησιμοποιεί το συγκεκριμένο μοντέλο, το οποίο είναι εντεταγμένο στο υπολογιστικό πακέτο DAMASK [7]. Παρακάτω παρατίθενται οι σημαντικές αρχές του μοντέλου για την κατανόηση των βασικών εννοιών του. Τα μοντέλα βασισμένα στις διαταραχές, αποτελούνται από το νόμο πλαστικής ροής και εργοσκήρυνσης. Σε αυτήν την περίπτωση και οι δύο νόμοι συνδέονται με τις διαταραχές του υλικού. Για τον κινητικό νόμο χρησιμοποιείται η εξίσωση του Orowan [42]

$$\dot{\gamma}^a = \rho_m^a b v^a \quad (2.8)$$

συνδυάζοντας έτσι τις διαταραχές με τον ρυθμό διάτμησης, όπου ρ_m^a η πυκνότητα των ενεργών διαταραχών, b το διάνυσμα Burgers και v η μέση ταχύτητα των διαταραχών αυτών. Για να επέλθει κίνηση των διαταραχών η ασκούμενη τάση πρέπει να ξεπεράσει ένα κατώφλι τάσης ώστε να είναι ικανή να υπερνικήσει τα εμπόδια της μικροδομής, όπως όρια κόκκων, διασταυρώσεις διαταραχών κλπ. Αυτό το κατώφλι ορίζεται ως κρίσιμη ανηγμένη διατμητική τάση τ_{cr} . Η τάση τ_{eff} που λειτουργεί ως κινητήρια δύναμη στην κίνηση των διαταραχών, υπολογίζεται ως η διαφορά της ασκούμενης ανηγμένης τάσης και της κρίσιμης ανηγμένης διατμητικής τάσης ως εξής:

$$\tau_{eff} = (|\tau| - \tau_{cr}) \text{sgn}\tau \quad (2.9)$$

όταν η ασκούμενη τάση είναι μεγαλύτερη από την τ_{cr} , αλλιώς είναι ίση με 0 [33]. Όσον αφορά την εργοσκήρυνση, αυτή μπορεί να περιγραφεί, όπως γίνεται και στην πραγματικότητα, με την εξέλιξη της πυκνότητας διαταραχών. Η μαθηματικοποίηση των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα μεταξύ των διαταραχών και περιγράφηκαν στο Κεφάλαιο 2.2, αποτελούν τη βάση του μοντέλου αυτού. Τελικά, το μοντέλο αυτό χρειάζεται πολύ περισσότερες παραμέτρους από τα φαινομενολογικά μοντέλα, θυσιάζοντας υπολογιστική ταχύτητα για ακριβέστερα αποτελέσματα [7].

2.3.3 Φασματική Μέθοδος

Για την επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων των καταστατικών νόμων για κάθε ξεχωριστό στοιχείο του κρυστάλλου είναι απαραίτητη η χρήση αριθμητικών μεθόδων επίλυσής τους [43]. Η πιο διαδεδομένη τέτοια μέθοδος είναι η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (FEM), η οποία χωρίζει το μελετούμενο όγκο σε ένα πλέγμα

πεπερασμένων στοιχείων απλού σχήματος (όπως κύβοι, πυραμίδες κλπ), στα οποία επιλύονται τοπικές συνοριακές συνθήκες, απλοποιώντας αρκετά την επίλυση [44]. Τη μέθοδο αυτή χρησιμοποιούν πολλά γνωστά λογισμικά όπως το Abaqus FEA, το Ansys και το Marc.

Από την άλλη, οι φασματικές μέθοδοι, πρώτα αναπτύχθηκαν από τους Moulinec και Suquet [45][46] για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των σύνθετων υλικών, στη συνέχεια επεκτάθηκαν για την ιξωδοπλαστικότητα (viscoplasticity) [47] και για τα πολυκρυσταλλικά υλικά [48]. Έχουν αποδειχθεί αποδοτικότερες έναντι του FEM για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς των πολυκρυσταλλικών υλικών [49][50][51][52]. Αντίστοιχα με το FEM οι φασματικές μέθοδοι είναι αλγόριθμοι αριθμητικής επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων. Η διαφορά τους έγκειται στο γεγονός ότι οι φασματικές μέθοδοι δεν διακριτοποιούν τον όγκο σε πεπερασμένα στοιχεία και λύνουν τις εξισώσεις αυτές για κάθε σημείο ξεχωριστά, θεωρώντας τοπική ισορροπία, αλλά ακολουθούν μια πιο συνολική προσέγγιση λύνοντας ένα μεγάλο σετ βασικών συναρτήσεων [43]. Σε αντίθεση με το FEM, το οποίο μπορεί να λειτουργήσει και σε περίπλοκα σχήματα, οι φασματικές μέθοδοι απαιτούν τη χρήση RVE για την επίλυση των εξισώσεων αυτών. Ως αποτέλεσμα, περιορίζεται στην επίλυση περιοδικών μικροδομών [52].

Πιο συγκεκριμένα, στο DAMASK η φασματική μέθοδος εφαρμόζεται ως εξής: Η απεικόνιση της παραμόρφωσης $\chi(x) : x \in \mathcal{B}_0 \rightarrow y \in \mathcal{B}$ στο πεδίο $\mathcal{B}_0 \subset \mathcal{R}^3$ μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\chi(x) = \bar{F}x + \tilde{w}(x) \quad (2.10)$$

όπου \bar{F} είναι το μακροσκοπικό σώμα μετατόπισης και $\tilde{w}(x)$ το τοπικά κυμαινόμενο σώμα μετατόπισης. Αυτή αποτελεί τη βασική συνάρτηση για την επίλυση της μηχανικής ισορροπίας. Η συνέχεια της μεθόδου περιγράφεται στην ακόλουθη βιβλιογραφία [53][54][43].

Η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων που περιγράφονται στην παραπάνω βιβλιογραφία πραγματοποιείται με τον αλγόριθμο των γρήγορων μετασχηματισμών Fourier (FFT) στο πεδίο \mathcal{B}_0 , το οποίο διακριτοποιείται σε ένα πλέγμα $N_x \times N_y \times N_z = N$ σημείων. Η επίλυση προσεγγίζεται στον χώρο Fourier και αντιστοιχίζεται με τον πραγματικό χώρο μέσω του αλγορίθμου FFT [7].

2.3.4 Στοιχειώδης Αντιπροσωπευτικός Όγκος (RVE)

Τα περισσότερα υλικά σε μεγάλη κλίμακα, μοιάζουν ομογενή τόσο στην όψη όσο και στις ιδιότητες. Ωστόσο σε μικρότερη κλίμακα, όλα τα υλικά είναι ετερογενή εκ φύσεως. Στα πολυκρυσταλλικά υλικά οι ιδιότητές τους εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τα χαρακτηριστικά της μικροδομής, όπως η γεωμετρία των φάσεων που την αποτελούν, τη κατανομή, τον προσανατολισμό, το σχήμα και το κλάσμα όγκου τους, τα οποία με τη σειρά τους εξαρτώνται από την θερμομηχανική τους ιστορία και την χημική σύσταση του υλικού [55]. Ανάλογα την κλίμακα μοντελοποίησης, τα υλικά θεωρούνται ομοιογενή, χωρίς να λαμβάνονται υπόψιν τα χαρακτηριστικά της μικροδομής που αναλύθηκαν πιο πάνω. Η μέθοδος των στοιχειωδών αντιπροσωπευτικών όγκων (RVEs) για την απεικόνιση του υλικού, συμπεριλαμβάνει τα χαρακτηριστικά της μικροδομής, προσμετρώντας έτσι την επιρροή της στις μηχανικές ιδιότητες του υλικού [55]. Πιο συγκεκριμένα, ένας στοιχειώδης αντιπροσωπευτικός όγκος ορίζεται ως μια πεπερασμένη περιοχή του υλικού, η οποία είναι αρκετά μεγάλη ώστε να είναι αντιπροσωπευτική για ολόκληρο το υλικό και έχει σχεδόν τις ίδιες ιδιότητες όπως και ο συνολικός όγκος του υλικού [56]. Με αυτόν τον ορισμό, το μέγεθος του RVE εξαρτάται από το υλικό και την ιδιότητα υπό μελέτη [56].

Κεφάλαιο **3**

Υπολογιστικό Μέρος

3.1 Δημιουργία Αρχείων Εισόδου

Για την προσομοίωση της εξέλιξης της μικροδομής και την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς του κράματος AA6063 ανάλογα με τις διάφορες συνθήκες φόρτισης, χρησιμοποιείται το λογισμικό πακέτο DAMASK, η λειτουργία του οποίου έχει αναφερθεί στην παράγραφο 2.3.2.

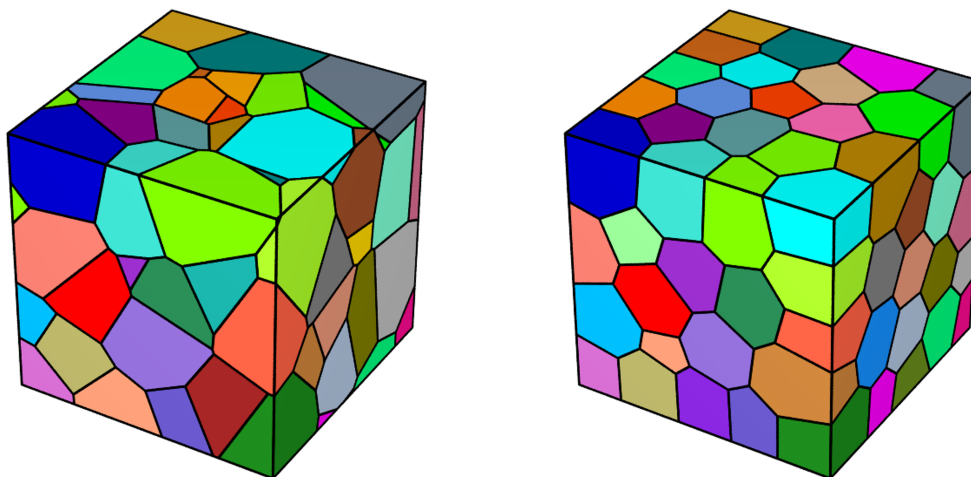
Το λογισμικό αυτό λαμβάνει τρία αρχεία ως είσοδο, τα οποία ορίζουν την γεωμετρία του αντιπροσωπευτικού όγκου, τις συνθήκες φόρτισης και τις παραμέτρους του υλικού.

3.1.1 Αρχείο Γεωμετρίας

Το αρχείο γεωμετρίας αποτελείται από ένα RVE στο οποίο ασκούνται οι συνθήκες φόρτισης. Μέσω αυτού περιγράφονται οι διαστάσεις του αντιπροσωπευτικού όγκου, ο αριθμός των κόκκων και ο αριθμός των pixels στα οποία θα γίνει η επίλυση των καταστατικών νόμων μέσω του φασματικού επιλύτη.

Το DAMASK έχει τη δυνατότητα δημιουργίας RVE με τη χρήση της ενότητας `damask.Grid` με την οποία μπορεί να δημιουργηθεί RVE χρησιμοποιώντας τη ψηφίδωση Voronoi. Μια εναλλακτική είναι η χρήση ενός υποστηρικτικού λογισμικού πακέτου για τη δημιουργία μικροδομής, το οποίο είναι πιο ευέλικτο στη δημιουργία του αρχείου γεωμετρίας και προσφέρει περισσότερες μορφολογικές ιδιότητες, πέρα από την ψηφίδωση Voronoi. Το πρόγραμμα που χρησιμοποιήθηκε είναι το Neper για τον σκοπό αυτό, οι δυνατότητες του οποίου αναφέρονται με περισσότερη λεπτομέρεια στο Παράρτημα Β'. Επιλέχθηκε η χρήση της `graingrowth` μορφολο-

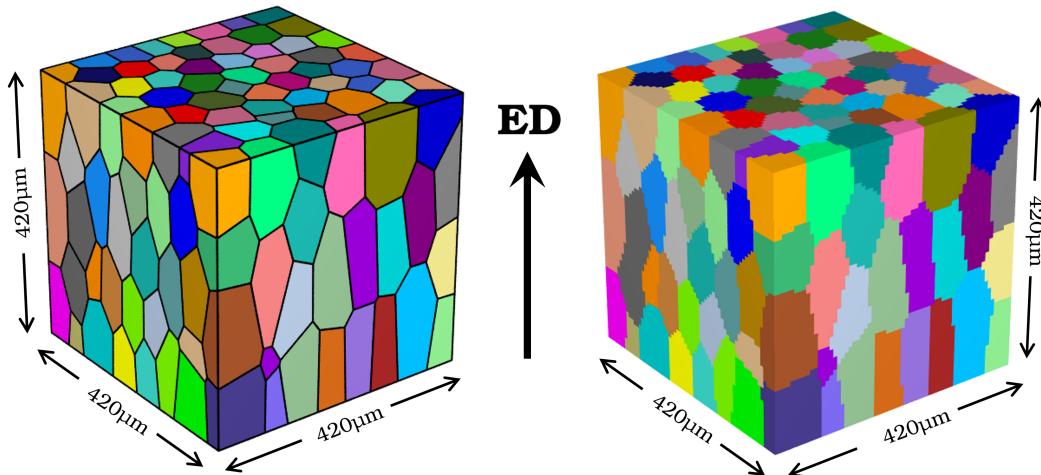
γίας για την ανάπτυξη των κόκκων, η οποία αντιστοιχεί καλύτερα στα πραγματικά πολυκρυσταλλικά υλικά.



Σχήμα 3.1: Αριστερά το RVE με χρήση του αλγορίθμου Voronoi και δεξιά το RVE με χρήση του Neper και τη μορφολογία *graingrowth*.

Συγκρίνοντας τα δύο RVE του Σχήματος 3.1 παρατηρείται ότι η ψηφίδωση Voronoi βγάζει ικανοποιητικά αποτελέσματα μικροδομής. Ωστόσο, έχει μερικά μειονεκτήματα. Με μια γρήγορη παρατήρηση, το μέγεθος των κόκκων παρουσιάζει ευρεία κατανομή. Δεύτερον, ορισμένοι κόκκοι εμφανίζουν αρκετά οξείες γωνίες κάτι που δεν αντιπροσωπεύει πραγματικές μικροδομές. Αντίθετα, στο δεξί RVE παρατηρείται ότι οι κόκκοι είναι πολύ πιο αντιπροσωπευτικοί μιας πραγματικής μικροδομής, αφού παρουσιάζουν μεγαλύτερη σφαιρικότητα, μικρότερη τυπική απόκλιση στο μέγεθός τους και πιο ομαλές γωνίες. Το DAMASK διαβάζει μόνο αρχεία .vti για το αρχείο γεωμετρίας σε μορφή raster. Συνεπώς, το αρχείο χρειάζεται μια επιπλέον μετατροπή έτσι ώστε να ψηφιοποιηθεί μέσω pixels.

Για την συγκεκριμένη προσομοίωση μικροδομής του κράματος AA6063, το οποίο είναι προϊόν διέλασης, πρέπει να προστεθεί και μια αναλογία διαστάσεων στους κόκκους παράλληλα στον άξονα διέλασης, ώστε να ανταποκρίνεται καλύτερα στην πραγματικότητα. Επίσης, στα επόμενα βήματα θα χρειαστεί να προστεθεί και ο κρυσταλλογραφικός ιστός του κράματος για την μελέτη της ανισοτροπίας του, συνεπώς ο αριθμός των κόκκων για να είναι αντιπροσωπευτική η προσομοίωση πρέπει να είναι τουλάχιστον 300. Συνεπώς το τελικό RVE της προσομοίωσης είναι το παρακάτω.



Σχήμα 3.2: Τελική μορφή RVE του κράματος AA6063 σε μορφή εικόνας (αριστερά) και ψηφιοποιημένη (δεξιά).

Η τελική μορφή του RVE είναι ένας κύβος μεγέθους ακμής 420µm σε ανάλυση 64:64:64 pixels, ο οποίος αποτελείται από 300 κόκκους.

3.1.2 Αρχείο Συνθηκών Φόρτισης

Το αρχείο των συνθηκών φόρτισης αποτελείται από δύο μέρη, τον επιλύτη και το βήμα φόρτισης. Για επιλύτη μπορεί να επιλεγεί είτε ο φασματικός επιλύτης, που χρησιμοποιείται και στην παρούσα εργασία ή επιλύτης πεπερασμένων στοιχείων (FEM). Στο βήμα φόρτισης περιγράφονται όλες οι λεπτομέρειες σχετικά με το κάθε βήμα φόρτισης της προσομοίωσης και αποτελείται από ένα σύνολο παραμέτρων. Αρχικά, πρέπει να γίνει διακριτοποίηση του βήματος φόρτισης ορίζοντας τον αριθμό των βημάτων, N , και του συνολικού χρόνου φόρτισης, t , έτσι ώστε:

$$t = \sum_{i=1}^N \Delta t_i \quad (3.1)$$

Το επόμενο βήμα είναι η διατύπωση των οριακών συνθηκών φόρτισης. Μέσω του DAMASK πρέπει να τεθούν η βαθμίδα παραμόρφωσης και ο πρώτος τανυστής τάσης Piola - Kirchhoff στο τέλος του βήματος φόρτισης ή οι αντίστοιχες πρώτες παράγωγοί τους ως προς τον χρόνο. Στις προσομοιώσεις που διεξήχθησαν χρησιμοποιήθηκαν ο

ρυθμός της βαθμίδας παραμόρφωσης (\dot{F}) και ο πρώτος τανυστής τάσης Piola – Kirchhoff για τον ορισμό των οριακών συθηκών, τα στοιχεία των οποίων αναπαριστώνται παρακάτω.

$$\dot{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial X_x} & \frac{\partial v_x}{\partial X_y} & \frac{\partial v_x}{\partial X_z} \\ \frac{\partial v_y}{\partial X_x} & \frac{\partial v_y}{\partial X_y} & \frac{\partial v_y}{\partial X_z} \\ \frac{\partial v_z}{\partial X_x} & \frac{\partial v_z}{\partial X_y} & \frac{\partial v_z}{\partial X_z} \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_{xx} & P_{xy} & P_{xz} \\ P_{yx} & P_{yy} & P_{yz} \\ P_{zx} & P_{zy} & P_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Για παράδειγμα, για τον μονοαξονικό εφελκυσμό κατά τον άξονα x με ρυθμό παραμόρφωσης ίσο με 10^{-3} οι παραπάνω τανυστές ορίζονται ως εξής:

$$\dot{\mathbf{F}} = 10^{-3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix} s^{-1} \quad (3.4)$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & 0 & * \\ * & * & 0 \end{bmatrix} Pa \quad (3.5)$$

Με "0" δεν επιτρέπεται η ανάπτυξη της τάσης / παραμόρφωσης κατά αυτές τις διευθύνσεις, ενώ με "*" αφήνεται ελεύθερη η ανάπτυξη τους.

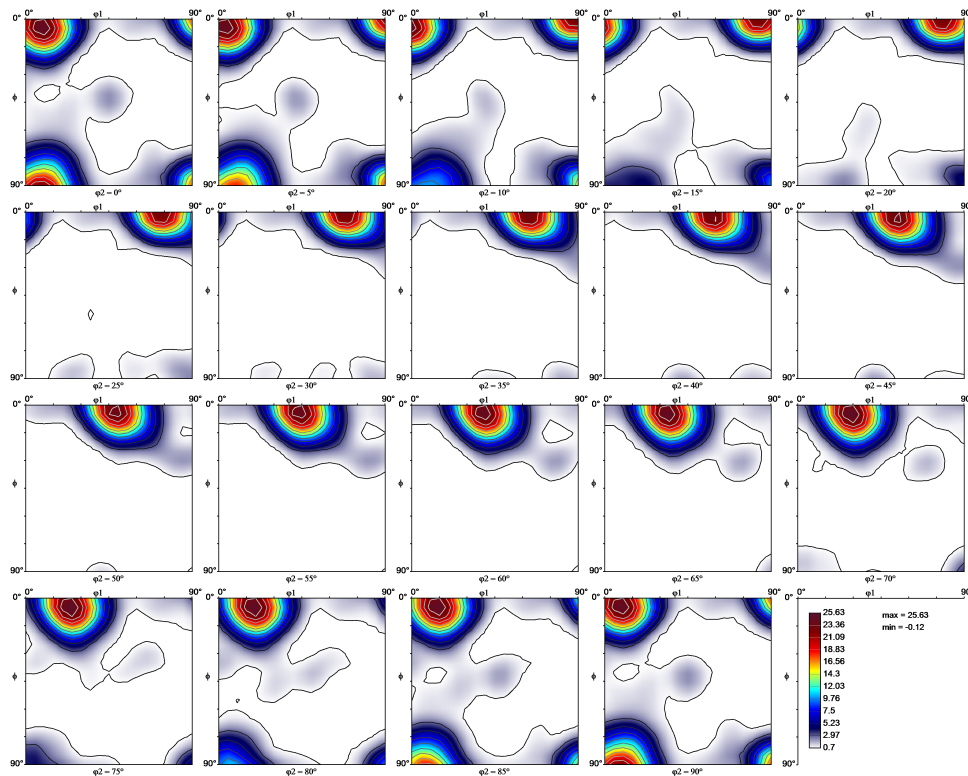
3.1.3 Αρχείο Παραμέτρων Υλικού

Το αρχείο αυτό αποτελείται από ένα σύνολο παραμέτρων οι οποίες εκφράζουν τη συμπεριφορά του υλικού κατά την παραμόρφωσή του υπό διάφορες συνθήκες φόρτισης, θερμοκρασίας ακόμα και εξέλιξης αστοχίας. Εντός του αρχείου αυτού περιέχεται ένα λεξικό το οποίο ορίζει τις παραμέτρους και τους καταστατικούς νόμους της κάθε φάσης του υλικού και μια λίστα η οποία συνδέει τον κάθε κόκκο του υλικού από το αρχείο γεωμετρίας με τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό του (εκφρασμένο σε τετραδόνια), το κλάσμα όγκου του και τις παραμέτρους της φάσης του.

Για το κάθε υλικό πρέπει να οριστεί το σύστημα κρυστάλλωσής του, ώστε να

εφαρμοστούν οι νόμοι της πλαστικότητας κρυστάλλου με τα σωστά συστήματα κρυστάλλωσης και για το μηχανικό κομμάτι, πρέπει επίσης να οριστούν οι παράμετροι για την ελαστική και πλαστική συμπεριφορά του υλικού. Συγκεκριμένα, για την προσομοίωση της παραμόρφωσης του κράματος AA6063 οι σταθερές παράμετροι του πίνακα Α΄.1 και Α΄.2 πάρθηκαν αυτούσιες έπειτα από βιβλιογραφική ανασκόπηση, ενώ οι παράμετροι του πίνακα Α΄.3 βελτιστοποιήθηκαν ώστε να προσομοιάσουν την πειραματική καμπύλη εφελκυσμού.

Όσον αφορά την εισαγωγή του κρυσταλλογραφικού ιστού για την μελέτη της εξέλιξής του, ακολουθήθηκε η παρακάτω διαδικασία. Αρχικά, από την ΕΛΚΕΜΕ ΑΕ λήφθηκαν πειραματικά δεδομένα του ιστού για το κράμα AA6063 έπειτα από διέλαση. Πιο συγκεκριμένα, αντλήθηκαν οι γωνίες Euler για τον προσανατολισμό του κάθε κόκκου της πειραματικής μικροδομής για την αποτύπωση ενός στατιστικού ιστού. Το αρχείο .txt μετατράπηκε μέσω του DAMASK σε τετραδόνια και εισήχθη στο αρχείο παραμέτρων του υλικού. Έτσι, οι τομείς ODF του αρχικού κρυσταλλογραφικού ιστού αποτυπώνονται στο Σχήμα 3.3 μέσω του προγράμματος ATEX [57]. Από τους τομείς ODF του σχήματος, το κράμα χαρακτηρίζεται από ισχυρό Cube ιστό και έχει συστατικά Brass και Goss.



Σχήμα 3.3: Τομείς ODF αρχικού κρυσταλλογραφικού ιστού.

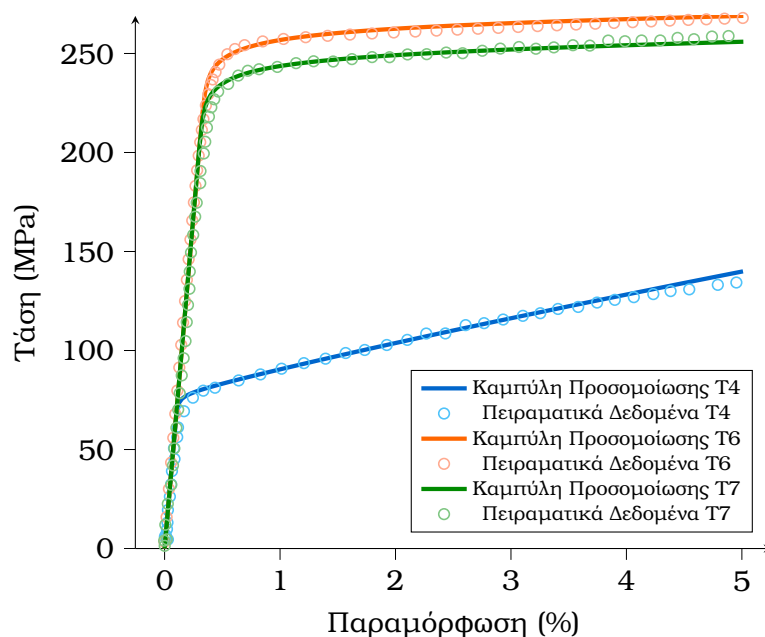
Κεφάλαιο **4**

Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

Στο κεφάλαιο αυτό παρατίθενται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων πλαστικότητας κρυστάλλου που διεξήχθησαν για διαφορετικές συνθήκες φόρτισης του κράματος AA6063. Η εκτέλεσή τους πραγματοποιήθηκε με χρήση του υπολογιστικού πακέτου DAMASK και του μοντέλου πλαστικής απόκρισης βασισμένο σε φυσικές εξισώσεις. Τα αποτελέσματα, που λήφθηκαν, προσφέρουν σημαντικές πληροφορίες σχετικά με την μηχανική απόκριση του κράματος και των φαινομένων που τα διέπουν. Μετά το πέρας της προσομοίωσης είναι απαραίτητη η επεργασία και η ανάλυση των δεδομένων που προκύπτουν, καθώς και η χρήση εξωτερικών προγραμμάτων (Python, Paraview) για την οπτικοποίηση και την καλύτερη κατανόηση των αποτελεσμάτων.

4.1 Προσομοίωση Μηχανικής Συμπεριφοράς σε Διαφορετικές Συνθήκες Φόρτισης

Το DAMASK στη βάση του επιλύει το σύστημα εξισώσεων της μηχανικής συνεχούς μέσου, χρησιμοποιώντας τον φασματικό επιλύτη του, ανάλογα με τις εξισώσεις του μοντέλου που έχει επιλεγεί. Συνεπώς, ως δεδομένα εξόδου υπολογίζει την εξέλιξη της βαθμίδας παραμόρφωσης (F), του πρώτου τανυστή τάσης Piola - Kirchhoff και του προσανατολισμού των σημείων υπολογισμού μετά την επιβολή φορτίου για κάθε διαδοχικό στάδιο φόρτισης. Έτσι, προκύπτει ένας τανυστής τρίτης τάξης ($262144 \times 3 \times 3$) για κάθε μέγεθος, ο οποίος αποτυπώνει τις 9 συνιστώσες της παραμόρφωσης και τάσης, αντίστοιχα, για κάθε σημείο υπολογισμού ($64:64:64 = 262144$ σημεία). Από αυτά τα δεδομένα και μόνο είναι δύσκολο να κατανοηθεί η μηχανική συμπεριφορά



Διάγραμμα 4.1: Σύγκριση καμπύλης προσομοίωσης με τα πειραματικά δεδομένα του κράματος AA6063.

του κράματος, τόσο λόγω του όγκου τους, όσο και λόγω της μορφής τους. Ως εκ τούτου, καθίσταται αναγκαία η ορθή ανάλυση, επεξεργασία και οπτικοποίηση τους. Αρχικά, η βαθμίδα παραμόρφωσης μετασχηματίστηκε σε τανυστή παραμόρφωσης και έπειτα αντλήθηκαν συγκεκριμένα διανύσματα του τανυστή αυτού και της τάσης, ανάλογα την διεύθυνση φόρτισης, για να εκφραστεί μονοδιάστατα η επιβολή του φορτίου.

4.1.1 Σύγκριση με Πειραματικά Δεδομένα

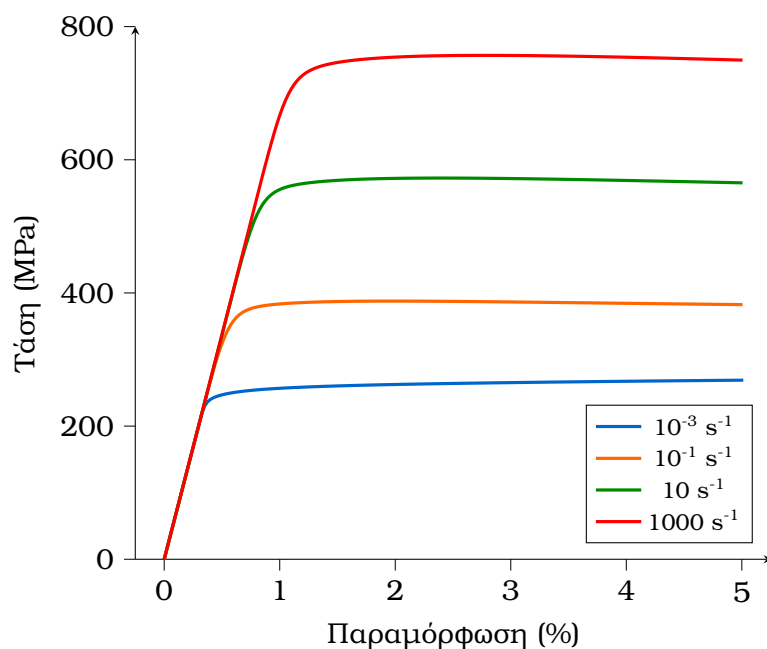
Για την επαλήθευση των δεδομένων της προσομοίωσης πραγματοποιήθηκε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα εφελκυσμού του κράματος AA6063 από την ΕΛΚΕΜΕ ΑΕ. Το διάγραμμα 4.1 παρουσιάζει συνολικά τα δεδομένα αυτά για τρεις διαφορετικές θερμικές κατεργασίες του κράματος αυτού (T4, T6 και T7). Η φόρτιση και στις τρεις περιπτώσεις ασκείται παράλληλα στον άξονα διέλασης. Με συνεχείς ευθείες συμβολίζονται τα δεδομένα της προσομοίωσης, τα οποία επεξεργάστηκαν μέσω της Python για να προκύψουν οι καμπύλες τάσης - παραμόρφωσης.

Αντίστοιχα, με σημεία συμβολίζονται τα πειραματικά δεδομένα. Παρατηρείται ότι οι καμπύλες έχουν πολύ καλή προσαρμογή με τις πειραματικές μετρήσεις, ανεξάρτητα των θερμικών κατεργασιών, γεγονός που επιβεβαιώνει την αξιοπιστία του

μοντέλου και της προσομοίωσης.

4.1.2 Επίδραση Ρυθμού Παραμόρφωσης

Στη συνέχεια, μελετήθηκε η επίδραση του ρυθμού παραμόρφωσης κατά τη μηχανική φόρτιση του κράματος για τέσσερις διαφορετικές συνθήκες, 10^{-3} , 10^{-1} , 10 και 1000 s^{-1} έπειτα από θερμική κατεργασία T6. Παρατηρείται η σημαντική αύξηση του ορίου διαρροής με ολοένα αυξανόμενο ρυθμό παραμόρφωσης. Η φαινομενική αύξηση στις μηχανικές ιδιότητες και συγκεκριμένα στο όριο διαρροής οφείλεται στο ότι κατά την επιβολή φορτίου με ολοένα αυξανόμενο ρυθμό, οι διαταραχές έχουν όλο και λιγότερο χρόνο να πραγματοποιήσουν ολίσθηση κατά μήκος των ευνοϊκών κρυσταλλογραφικών επιπέδων, με αποτέλεσμα να δυσχεραίνεται η πλαστική παραμόρφωση. Με άλλα λόγια, η αύξηση του ρυθμού παραμόρφωσης λειτουργεί ως εμπόδιο στην ολίσθηση των διαταραχών. Το διάγραμμα 4.2 παρουσιάζει αυτήν την επίδραση.



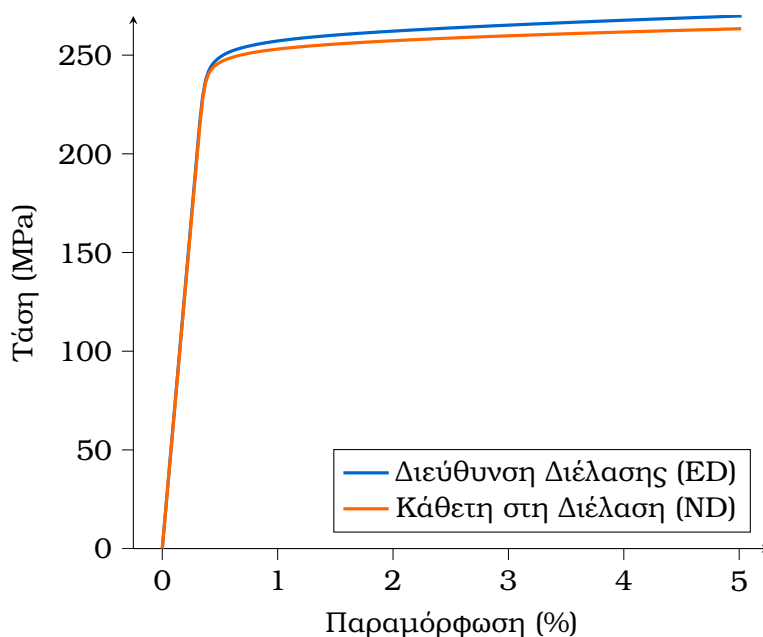
Διάγραμμα 4.2: Σύγκριση καμπύλων τάσης - παραμόρφωσης με διαφορετικούς ρυθμούς παραμόρφωσης.

4.1.3 Επίδραση Ανισοτροπίας

Η ανισοτροπία στα πολυκρυσταλλικά υλικά είναι άλλη μια παράμετρος, που δραματίζει κρίσιμο ρόλο στις μηχανικές τους ιδιότητες. Ένα αίτιο που την προκαλεί

σε ένα μεταλλικό υλικό είναι η έλλειψη συμμετρίας των κόκκων του (π.χ. πεπλατυσμένοι κόκκοι), λόγω της θερμομηχανικής του ιστορίας (έλαση, διέλαση, θερμικές κατεργασίες κ.λ.π). Αυτό οδηγεί σε διαφορετική κατανομή της φόρτισης ανάλογα τον άξονα στον οποίο ασκείται. Ωστόσο, ο κυριότερος λόγος για τον οποίον τα μεταλλικά υλικά παρουσιάζουν ανισοτροπία στην μηχανική τους απόκριση είναι ο κρυσταλλογραφικός ιστός, ή ο προτιμητέος προσανατολισμός των κόκκων του. Από μόνι τους, οι μονοκρυσταλλοί (κόκκοι) είναι ανισότροποι, όπως έχει αναφερθεί και στην παράγραφο 2.3.1. Ο κρυσταλλογραφικός ιστός προκύπτει, λοιπόν, από το γεγονός ότι επιβάλλεται σε αρκετούς κόκκους προτιμητέος προσανατολισμός, λόγω πάλι της θερμομηχανικής ιστορίας του μετάλλου, με αποτέλεσμα ανάλογα τη διεύθυνση φόρτισης να αλλάζουν οι μηχανικές ιδιότητες του.

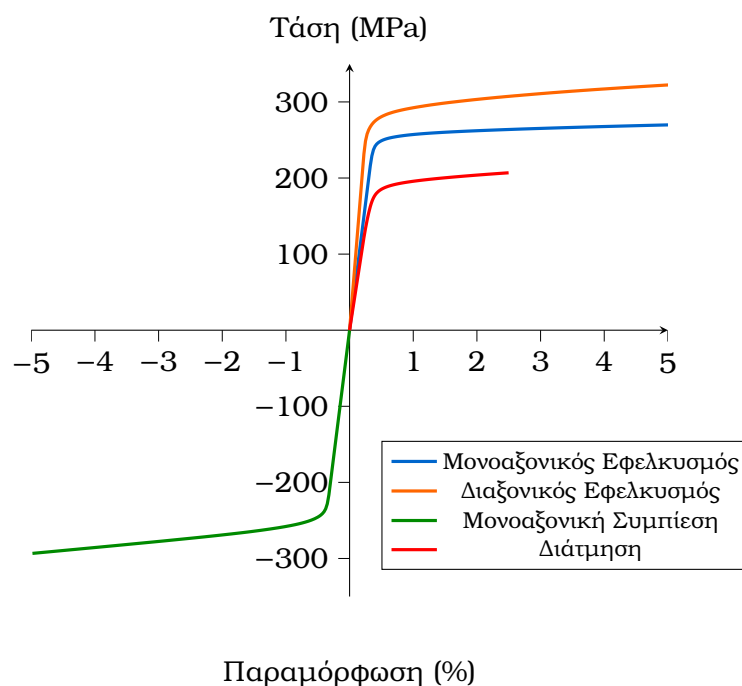
Η μικροδομή του κράματος AA6063 παρουσιάζει μια ασυμμετρία στο σχήμα των κόκκων (παράγραφος 3.1.1), καθώς και κρυσταλλογραφικό ιστό (Σχήμα 2.3), λόγω της διέλασης που υφίσταται. Οι δύο αυτές παράμετροι έχουν ενταχθεί στην προσομοίωση μέσω του αρχείου γεωμετρίας, όπως έχει αναφερθεί και στο πειραματικό μέρος. Στο διάγραμμα 4.3, παρουσιάζονται οι διαφορές στις μηχανικές ιδιότητες του κράματος AA6063 T6, με φόρτιση παράλληλα και κάθετα στη διεύθυνση έλασης.



Διάγραμμα 4.3: Σύγκριση καμπύλης τάσης - παραμόρφωσης με διαφορετικές διευθύνσεις φόρτισης.

4.1.4 Περίπλοκες Συνθήκες Φόρτισης

Το DAMASK δίνει στον χρήστη τη δυνατότητα, μέσω του αρχείου οριακών συνθηκών, να ορίσει περίπλοκες συνθήκες φόρτισης, πέρα από τον απλό εφελκυσμό, ορίζοντας συγκεκριμένες τιμές στον τανυστή τρίτης τάξης του ρυθμού της βαθμίδας παραμόρφωσης (\dot{F}). Μέχρι στιγμής, τα παραπάνω διαγράμματα έχουν προκύψει θέτοντας μια θετική τιμή στο \dot{F} σε έναν από τους τρεις κύριους άξονες παραμόρφωσης και μηδενίζοντας αυτούς της τροπής. Έτσι εξασφαλιζόταν μονοαξονικός εφελκυσμός. Στο διάγραμμα 4.4 παρουσιάζονται τρεις διαφορετικές συνθήκες φόρτισης, οι οποίες αντιστοιχούν σε τρεις διαφορετικούς τανυστές \dot{F} και έτσι συγκρίνεται η μηχανική απόκριση του κράματος σε σχέση με τον μονοαξονικό εφελκυσμό.

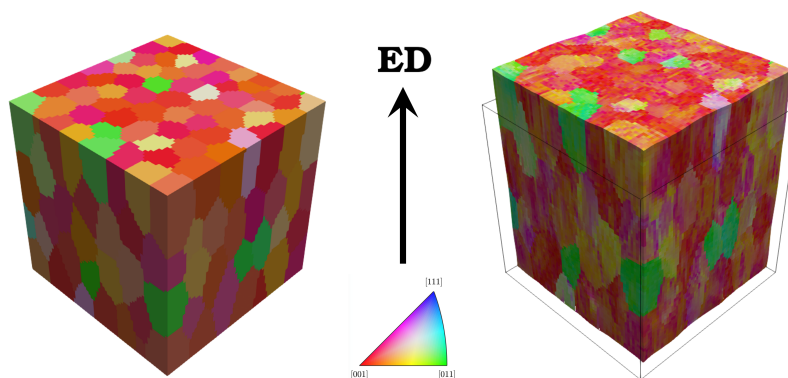


Διάγραμμα 4.4: Σύγκριση καμπύλης τάσης - παραμόρφωσης με περίπλοκες συνθήκες φόρτισης.

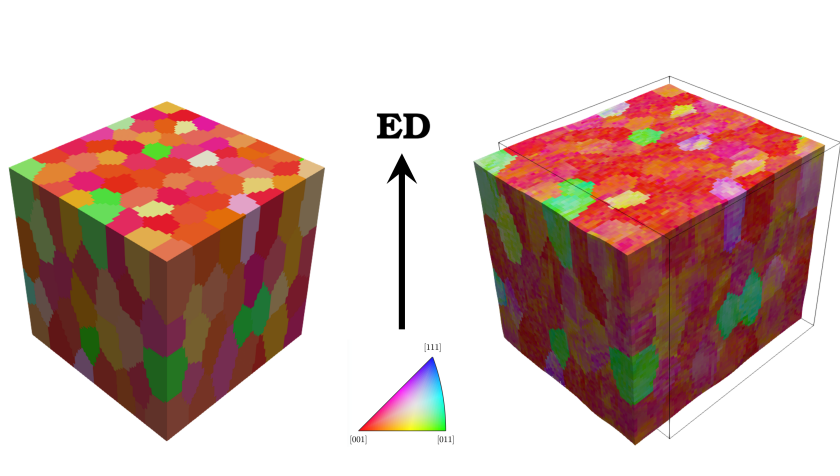
4.1.5 Εξέλιξη Μικροδομής και Κρυσταλλογραφικού Ιστού

Για την μελέτη του κρυσταλλογραφικού ιστού το DAMASK χρησιμοποιεί τετραδόνια για να εκφράσει τον προσανατολισμό κάθε σημείου υπολογισμού. Δηλαδή μετά από κάθε βήμα φόρτισης λαμβάνεται ένας τανυστής δεύτερης τάξης. Η εξέλιξη του ιστού προκύπτει σύμφωνα με τις αρχές της πλαστικότητας κρυστάλλου. Έτσι, το κάθε σημείο υπολογισμού περιστρέφεται ανάλογα με την κατανομή των τάσεων

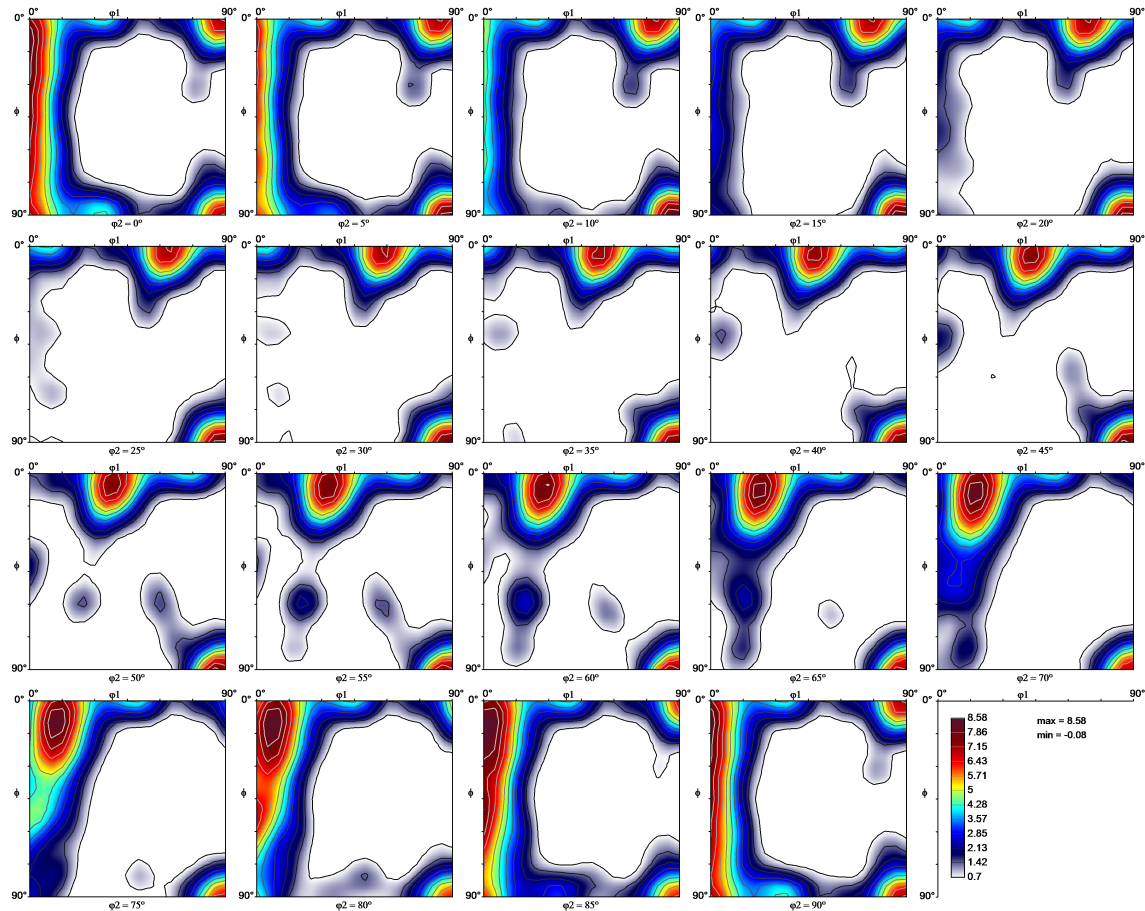
εντός του κρυστάλλου, όπως έχει περιγραφεί και στην παράγραφο 2.3.1 και φαίνεται και στο Σχήμα 4.4. Παρόλα αυτά, τα τετραδόνια δεν μπορούν να οπτικοποιηθούν εύκολα, ώστε να κατανοηθεί η εξέλιξη του ιστού. Γι' αυτόν τον λόγο εφαρμόζεται ένας μετασχηματισμός στα δεδομένα αυτά σε στερεογραφική προβολή και λαμβάνονται τα χρώματα Inverse Pole diagram (IPF). Από αυτά γίνεται καλύτερα αντιληπτός ο προσανατολισμός κάθε σημείου και μπορεί εύκολα να συσχετιστεί με τον χάρτη IPF, όπως φαίνεται και στις Εικόνες 4.1 και 4.2. Για καλύτερη ποσοτικοποίηση της εξέλιξης του ιστού, δημιουργήθηκαν οι τομείς ODF μετά το πέρας του εφελκυσμού (Σχήμα 4.3). Από τις τομείς ODF παρατηρείται η εξέλιξη του ιστού, που οφείλεται στην παραμόρφωση λόγω του εφελκυσμού σε συγκεκριμένη διεύθυνση.



Σχήμα 4.1: Εξέλιξη του κρυσταλλογραφικού ιστού κατά την φόρτιση παράλληλα στην διεύθυνση διέλασης.



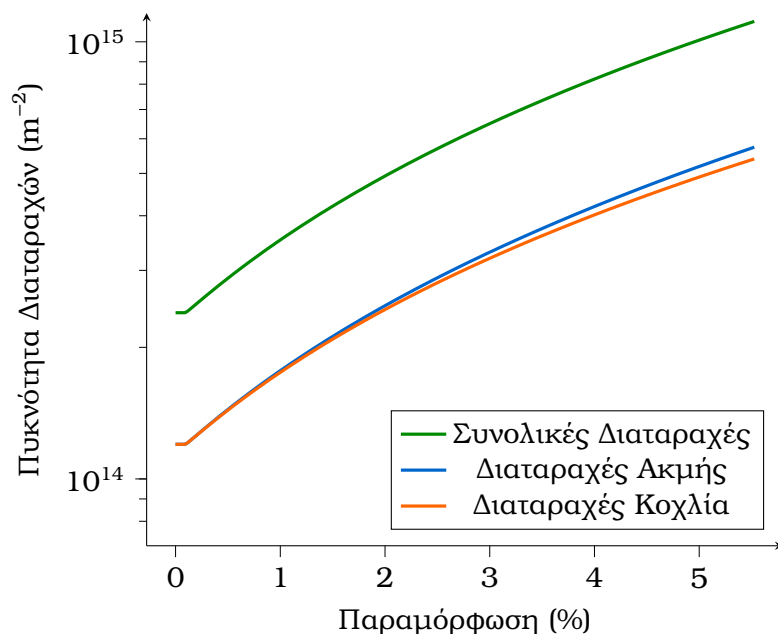
Σχήμα 4.2: Εξέλιξη του κρυσταλλογραφικού ιστού κατά την φόρτιση κάθετα στην διεύθυνση διέλασης.



Σχήμα 4.3: Τομές ODF κρυσταλλογραφικού ιστού μετά τον εφελκυσμό.

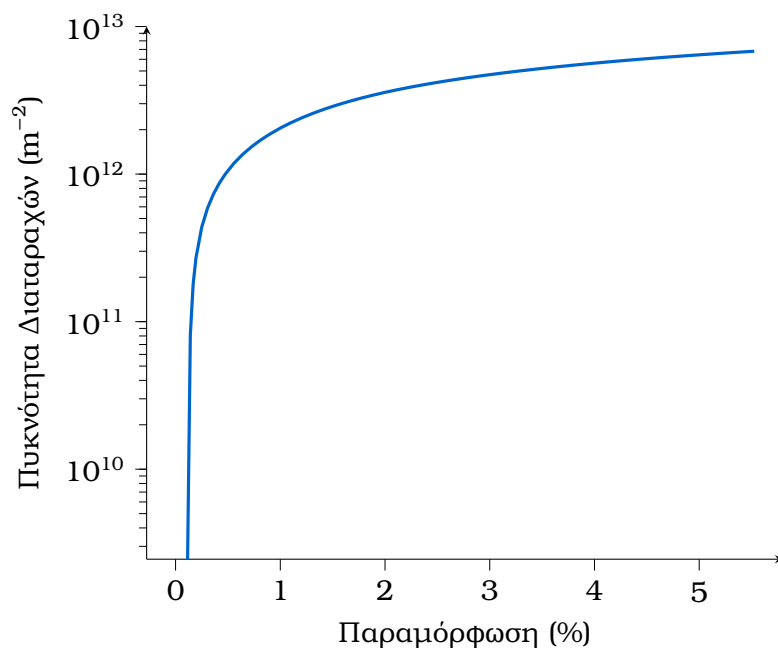
4.2 Προσομοίωση Εξέλιξης Πυκνότητας Διαταραχών

Όπως έχει αναφερθεί και στην παράγραφο 2.3.2.2 το φυσικό μοντέλο που χρησιμοποιεί το DAMASK για την πλαστική απόκριση του υλικού, βασίζεται στη θεωρία των διαταραχών (ενότητα 2.2). Έτσι, μέσω του υπολογιστικού πακέτου αυτού και την ανάλυση των δεδομένων που προκύπτουν από την προσομοίωση με την Python, είναι δυνατή η μελέτη της εξέλιξης της πυκνότητας των διαταραχών κατά τη μηχανική φόρτιση του κράματος AA6063. Το διάγραμμα 4.5 παρουσιάζει την εξέλιξη της πυκνότητας των διαταραχών ακμής και κοχλία, καθώς και των συνολικών διαταραχών κατά την παραμόρφωση. Οι τιμές των πρώτων προέκυψαν λαμβάνοντας υπόψιν μόνο τις μη ακινητοποιημένες διαταραχές λόγω αλληλεπιδράσεων, ενώ οι συνολικές είναι το άθροισμα των διαταραχών ακμής, κοχλία και των διπόλων που δημιουργούνται κατά την μηχανική φόρτιση.



Διάγραμμα 4.5: Εξέλιξη της πυκνότητας των διαταραχών ακμής, κοχλία και των συνολικών διαταραχών κατά την παραμόρφωση.

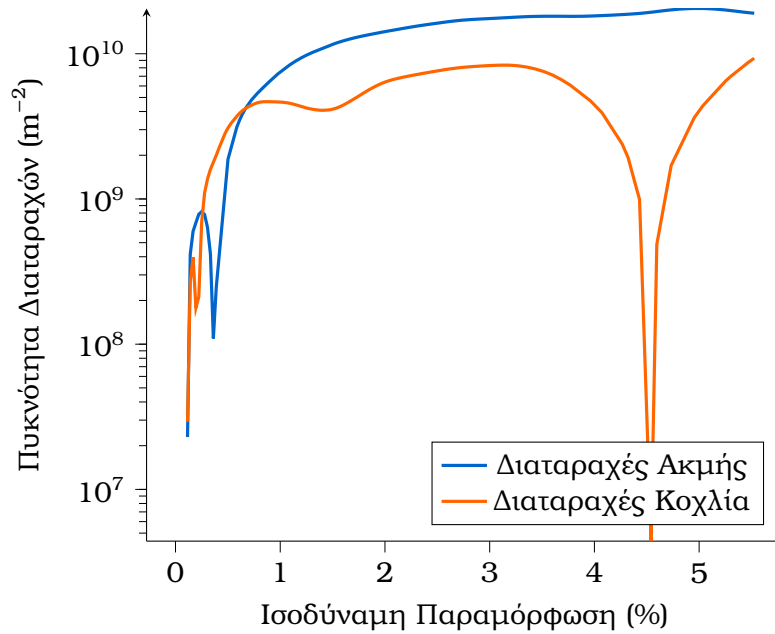
Η εξέλιξη της πυκνότητας των ακινητοποιημένων διαταραχών, οι οποίες δεν συυπολογίζονται στη συνολική πυκνότητα διαταραχών και λειτουργούν ως εμπόδια στην κίνηση των διαταραχών (παράγραφος 2.2.2), συμβάλλοντας έτσι στην εργοσκήρυνση παρουσιάζεται στο διάγραμμα 4.6.



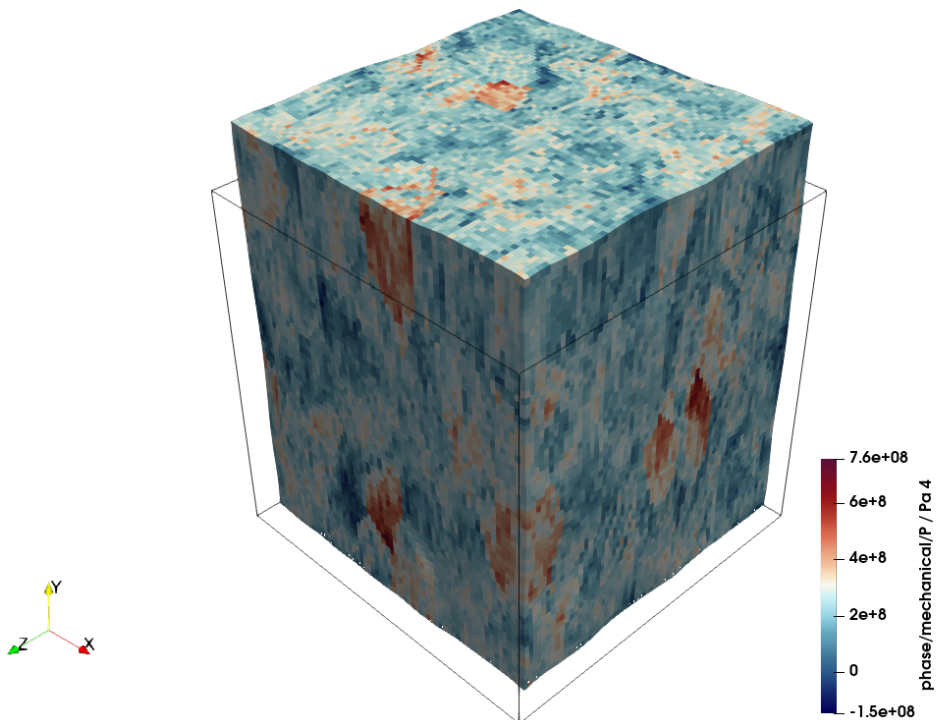
Διάγραμμα 4.6: Εξέλιξη πυκνότητας ακινητοποιημένων διαταραχών.

Τέλος, η εξέλιξη της πυκνότητας των γεωμετρικά απαραίτητων διαταραχών (Ge-

ometrically Necessary Dislocations (GND)), οι οποίες αποτελούν τη διαφορά των διαταραχών θετικού και αρνητικού προσήμου, παρουσιάζονται στο διάγραμμα 4.7.



Διάγραμμα 4.7: Εξέλιξη της πυκνότητας των γεωμετρικά απαραίτητων διαταραχών (GND) κατά την παραμόρφωση.



Σχήμα 4.4: Οπτικοποίηση τοπικής κατανομής τάσης εντός του RVE.

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα

Από τη μελέτη που πραγματοποιήθηκε σχετικά με την επίδραση των διαφορετικών συνθηκών φόρτισης στις μηχανικές ιδιότητες του κράματος αλουμινίου AA6063 με χρήση του υπολογιστικού πακέτου DAMASK, το οποίο βασίζεται στη μέθοδο πλαστικότητας κρυστάλλου, προκύπτουν τα παρακάτω συμπεράσματα :

1. Οι καμπύλες τάσης - παραμόρφωσης που προέκυψαν από το DAMASK για διαφορετικές θερμικές κατεργασίες (T4, T6, T7) έχουν εξαιρετική συσχέτιση με τα πειραματικά δεδομένα. Από αυτό προκύπτει ότι η προσομοίωση των καμπυλών μέσω του φυσικού μοντέλου πλαστικής απόκρισης, έχει τη δυνατότητα να μοντελοποιήσει τη συνολική μηχανική απόκριση των κραμάτων, με την ορθή επιλογή των παραμέτρων του, ανεξάρτητα από την κατεργασία.
2. Η επίδραση του ρυθμού παραμόρφωσης στις μηχανικές ιδιότητες αποτυπώθηκε για διαφορετικές τιμές του, ακόμα και για πολύ υψηλές τιμές (1000 s^{-1}), οι οποίες είναι πολύ δύσκολο να υλοποιηθούν με συμβατικό πειραματικό εξοπλισμό.
3. Αποδείχθηκε ότι η ανισοτροπία του κράματος (ασυμμετρία κόκκων, κρυσταλλογραφικός ιστός), έχει επίδραση στις μηχανικές ιδιότητες του κράματος, ο βαθμός της οποίας μπορεί να μοντελοποιηθεί επιτυχώς με τη χρήση της μεθόδου πλαστικότητας κρυστάλλου.
4. Πραγματοποιήθηκε προσομοίωση περίπλοκων συνθηκών φόρτισης, οι οποίες είναι αρκετά δύσκολο να μελετηθούν πειραματικά, αφού η εκάστοτε δοκιμή απαιτεί ειδικό πειραματικό εξοπλισμό και ειδικά δοκίμια για να μελετηθεί. Μέσω αυτών των δοκιμών λαμβάνεται μια πιο συνολική εικόνα της μηχανικής

συμπεριφοράς του κράματος. Παράλληλα, τα αποτελέσματα των δοκιμών αυτών μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό επιφανειών διαρροής, οι οποίες είναι απαραίτητες για την κατανόηση της μηχανικής ανισοτροπίας του υλικού και βρίσκουν εφαρμογή σε κατεργασίες όπως η βαθιά κοίλανση.

5. Έγινε οπτικοποίηση του κρυσταλλογραφικού ιστού και της κατανομής των τάσεων με χρήση του Paraview. Με αυτόν τον τρόπο, είναι εφικτή η βαθύτερη μελέτη της κατανομής της φόρτισης εντός του RVE και του ρόλου που διαδραματίζει ο προσανατολισμός και το σχήμα των κόκκων. Επιπλέον, κρίνεται σημαντική η πρόβλεψη του κρυσταλλογραφικού ιστού μετά από τις κατεργασίες, χωρίς τη χρήση επιπλέον πειραμάτων, εξοικονομώντας χρόνο και χρήμα.
6. Πραγματοποιήθηκε, επίσης, μέσω του φυσικού μοντέλου βασισμένου στη θεωρία των διαταραχών, μελέτη της εξέλιξης τους κατά τη μηχανική φόρτιση. Η μελέτη αυτή βοηθάει στην καλύτερη κατανόηση των φαινομένων που οδηγούν στην πλαστική παραμόρφωση, στην εργοσκλήρυνση και γενικότερα της μηχανικής απόκρισης του κράματος. Επιπλέον, τα αποτελέσματα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εισόδου για άλλα υπολογιστικά προγράμματα.
7. Είναι δυνατή η λήψη δεδομένων (π.χ. εξέλιξη πυκνότητας διαταραχών), με χρήση προσομοιώσεων και φυσικών μοντέλων μηχανικής απόκρισης, τα οποία δεν μπορούν να ληφθούν μόνο με χρήση παραδοσιακών πειραματικών διατάξεων.

5.1 Προτάσεις για Περαιτέρω Έρευνα

Η διπλωματική εργασία αυτή καταδεικνύει τις εξαιρετικές δυνατότητες του υπολογιστικού πακέτου DAMASK και τη χρήση της μεθόδου πλαστικότητας κρυστάλλου για την μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων του κράματος AA6063. Από τα παραπάνω αποτελέσματα και συμπεράσματα, προκύπτουν οι παρακάτω προτάσεις για περαιτέρω έρευνα:

1. Η εύρεση παραμέτρων που δεν μπορούν να παρθούν από βιβλιογραφία, μπορούν να υπολογιστούν με προσομοιώσεις μικρότερης κλίμακας ή να γίνει

χρήση αλγορίθμων βελτιστοποίησης, οι οποίοι θα προσαρμόζουν τις παραμέτρους αυτές σε μια πειραματική καμπύλη.

2. Ένταξη θερμικών και μοντέλων αστοχίας, πέρα του μηχανικού για την αποτύπωση περισσότερων φαινομένων κατά την πλαστική παραμόρφωση, όπως τη θέρμανση του δοκιμίου κατά τη φόρτιση, τη δημιουργία λαιμού και την τελική αστοχία.
3. Σύζευξη της μεθόδου πλαστικότητας κρυστάλλου με επιλύτη FEM, αξιοποιώντας τα πλεονεκτήματα και των δύο. Πιο συγκεκριμένα, μετά την μελέτη της μηχανικής συμπεριφοράς και την επεργασία των δεδομένων εξόδου του DAMASK, μπορούν αυτά να χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εισόδου στο FEM για την προσομοίωση του υλικού και την επίδραση περίπλοκης γεωμετρίας στις μηχανικές ιδιότητές του.

5.2 Επίδραση στους Στόχους Βιώσιμης Ανάπτυξης

Σημαντικό επίσης να αναφερθεί είναι ότι η μεθοδολογία που αναπτύσσεται στην παρούσα διπλωματική εργασία είναι ευθυγραμμισμένη με τους Στόχους Βιώσιμης Ανάπτυξης (ΣΒΑ) που έχουν τεθεί από τον Οργανισμό Ηνωμένων Εθνών (ΟΗΕ). Πιο συγκεκριμένα, η έρευνα που πραγματοποιήθηκε μπορεί να έχει το μεγαλύτερο αντίκτυπο στους στόχους 9 (Βιομηχανία, Καινοτομία και Υποδομές) και 12 (Υπεύθυνη Κατανάλωση και Παραγωγή). Για τον στόχο 9 (Σχήμα 5.1), με την ανάπτυξη προηγμένων υπολογιστικών μεθόδων και μεθοδολογιών, οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν από την βιομηχανία, ο σχεδιασμός και οι παραγωγικές διαδικασίες γίνονται πιο αποτελεσματικές. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ανάπτυξη πιο παραγωγικών και βιώσιμων κραμάτων και τεχνικών διαμόρφωσης, προάγοντας την καινοτομία και την τεχνολογική εξέλιξη. Όσον αφορά τον στόχο 12 (Σχήμα 5.1), το αλουμίνιο χρησιμοποιείται ως δομικό υλικό σε πολλές βιομηχανίες, όπως την αυτοκινητοβιομηχανία, την αεροναυπηγική και την κατασκευαστική. Με την ακριβή πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς του αλουμινίου σε διαφορετικές συνθήκες φόρτισης, μέσω των υπολογιστικών τεχνικών, όπως η μέθοδος πλαστικότητας κρυστάλλου, η παραγωγή, η κατεργασία των κραμάτων και ο έλεγχος των μηχανικών ιδιοτήτων γίνονται πιο α-

ποδοτικά. Με αυτόν τον τρόπο, εξοικονομούνται πρώτες ύλες και ενέργεια, αφού δεν χρειάζονται τόσες πειραματικές διατάξεις και ενισχύονται οι υπεύθυνες πρακτικές κατανάλωσης και παραγωγής.



Σχήμα 5.1: Οι Στόχοι Βιώσιμης Ανάπτυξης με τους οποίους ευθυγραμμίζεται η εργασία.

Παραρτήματα

Παράρτημα **A'**

Συγκεντρωτικοί Πίνακες Τιμών Παραμέτρων Μοντέλου Πλαστικότητας Κρυστάλλου

A'.1 Παράμετροι Αλληλεπίδρασης Διαταραχών

Για το εδροκεντρωμένο κυβικό σύστημα και το αλουμίνιο οι παράμετροι της παραγράφου 2.2.2 λαμβάνουν τις ακόλουθες τιμές.

Πίνακας A'.1: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών των διαφορετικών τύπων αλληλεπίδρασης διαταραχών.

Τύπος Αλληλεπίδρασης	Τιμή	Πηγή
Ιδία	0.122	[58]
Συνεπίπεδη	0.122	[58]
Συγγραμική	0.81	[59]
Παρεμπόδιση Hirth	0.205	[59]
Ευκίνητη	0.3	[59]
Παρεμπόδιση Lomer-Cottrell	0.38	[59]

Α'.2 Βιβλιογραφικές Παράμετροι

Πίνακας Α'.2: Συγκεντρωτικός πίνακας τιμών παραμέτρων από τη βιβλιογραφία.

Παράμετρος	Σύμβολο	Τιμή	Μονάδα Μέτρησης	Πηγή
Ελαστική Παράμετρος	C_{11}	106.43	GPa	[60]
Ελαστική Παράμετρος	C_{12}	60.35	GPa	[60]
Ελαστική Παράμετρος	C_{44}	28.21	GPa	[60]
Διάνυσμα Burgers	b	0.286	nm	[61]
Αριθμός Συστημάτων Ολίσθησης	N	12	-	[19]
Συντελεστής Αυτοδιάχυσης	D_0	7×10^{-29}	m^2/s	[34]
Συγκέντρωση Στερεού Διαλύματος	c_{at}	1.5×10^{-6}	-	[34]
Ατομικός Όγκος	Ω	1.7×10^{-29}	m^3	[34]
Πλάτος Διπλής Ετεροβαθμίδας	w_k	10.00	-	[34]

Α'.3 Εύρος Βιβλιογραφικών Παραμέτρων για Βελτιστοποίηση

Πίνακας Α'.3: Συγκεντρωτικός πίνακας εύρους τιμών παραμέτρων για βελτιστοποίηση.

Παράμετρος	Σύμβολο	Τιμή	Μονάδα Μέτρησης	Πηγή
Ολική Πυκνότητα Διαταραχών	ρ_0	$[10^{10}, 10^{15}]$	m^{-2}	[62]
Ελάχιστη Απόσταση μεταξύ Διπόλων Ακμής	d_{ed}	$[1, 10]10^{-9}$	m	[62][63]
Ελάχιστη Απόσταση μεταξύ Διπόλων Κοχλίας	d_{sc}	$[1, 10]10^{-9}$	m	[62][63]
Συντελεστής Πολλαπλασιασμού Διαταραχών	$k1$	(0,1)	-	[64]
Ιξώδες Διαταραχών	B	$[10^{-4}, 1]$	Pa·s	[23][65]
Παράμετρος p για την Ταχύτητα Αναρρίχησης	p	(0,1)	-	[7]
Παράμετρος q για την Ταχύτητα Αναρρίχησης	q	[1,2]	-	[7]
Παράγοντας Μέσης Ελεύθερης Διαδρομής	$k2, \lambda_0$	[20,60]	-	[62][66]
Τάση Peierls Διαταραχής Ακμής	τ_{ed}	[8,500]	MPa	[62][66]
Τάση Peierls Διαταραχής Κοχλίας	τ_{sc}	[8,500]	MPa	[62][66]
Συχνότητα Απόπειρας	v_a	$[10^6, 10^{11}]$	Hz	[62]
Ενέργεια Ενεργοποίησης Στερεού Διαλύματος	ΔF	$[1.5, 2.5]10^{-19}$	J	[62]

Παράρτημα **B'**

Υπολογιστικό Πακέτο Naper

Το Naper είναι ένα δωρεάν υπολογιστικό πακέτο ανοιχτού κώδικα, σκοπός του οποίου είναι η δημιουργία πολυκρυσταλλικών μικροδομών. Δίνει τη δυνατότητα στον χρήστη να δημιουργήσει μικροδομές από ένα ευρύ φάσμα μορφολογικών χαρακτηριστικών, από πολύ βασικά σχήματα, μέχρι και περίπλοκες πολυφασικές μικροδομές. Αποτελείται από 4 ενότητες, την ενότητα ψηφίδωσης (-T), δημιουργίας πλέγματος (-M), προσομοίωσης (-S) και οπτικοποίησης (-V). Στην συγκεκριμένη διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκαν οι ενότητες ψηφιδοποίησης και οπτικοποίησης για τη δημιουργία της μικροδομής.

Η ενότητα -T είναι υπεύθυνη για την δημιουργία ψηφιδώσεων ενός πεπερασμένου τρισδιάστατου ή δισδιάστατου χώρου. Αυτές μπορούν να δημιουργηθούν με διάφορες μορφολογικές ιδιότητες χρησιμοποιώντας την εντολή `-morpho`, όπως διαφορετικά σχήματα, τύποι ψηφίδωσης (Voronoi, Laguerre κ.α.). Ακόμα, οι κόκκοι μπορούν να υποδιαιρεθούν σε υποκόκκους, οι οποίοι κι αυτοί μπορούν να έχουν ξεχωριστές ιδιότητες, προσομοιάζοντας για παράδειγμα τις λαμέλες φερρίτη - σεμεντίτη στους χάλυβες. Στη συνέχεια με την εντολή `-domain` μπορεί να οριστεί ο χώρος της ψηφίδωσης, ορίζοντας και συνθήκες περιοδικότητας ή απεριοδικότητας με την επιλογή `-periodicity`. Τέλος, το αρχείο εξόδου μπορεί να λάβει είτε βαθμωτή μορφή (scalar `.tess`) ή μορφή raster (`.tesr`) με την εντολή `-format`.

Η ενότητα -V είναι υπεύθυνη για την οπτικοποίηση των μικροδομών και των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από τις άλλες ενότητες. Έχει τη δυνατότητα οπτικοποίησης ολόκληρης της μικροδομής ή μερών της με διαφορετικά χρώματα, στυλ και γωνίες θέασης. Μέσω αυτής της ενότητας δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να κατανοήσει καλύτερα τις μορφολογικές ιδιότητες που έχουν οριστεί σε προηγούμενες ενότητες.

Βιβλιογραφία

- [1] Jürgen HIRSCH. *Recent development in aluminium for automotive applications. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 24(7):1995–2002, 2014.
- [2] G.D. Jiang, Y.H. Cai, C. Qiu, W.W. Zhang και D.T. Zhang. *Effect of over-aging on the microstructure, mechanical properties and crashing performance of thin-walled Al-Mg-Si-Cu alloy profiles. Journal of Materials Research and Technology*, 21:3074–3085, 2022.
- [3] Haiming Zhang, Martin Diehl, Franz Roters και Dierk Raabe. *A virtual laboratory using high resolution crystal plasticity simulations to determine the initial yield surface for sheet metal forming operations. International Journal of Plasticity*, 80:111–138, 2016.
- [4] Wencheng Liu και Yong Pang. *A multi-scale modelling framework for anisotropy prediction in aluminium alloy sheet and its application in the optimisation of the deep-drawing process. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 114(11):3401–3417, 2021.
- [5] Wencheng Liu, Bernard K. Chen, Yong Pang και Ali Najafzadeh. *A 3D phenomenological yield function with both in and out-of-plane mechanical anisotropy using full-field crystal plasticity spectral method for modelling sheet metal forming of strong textured aluminum alloy. International Journal of Solids and Structures*, 193-194:117–133, 2020.
- [6] J. Yanagimoto, D. Banabic, M. Banu και L. Madej. *Simulation of metal forming - Visualization of invisible phenomena in the digital era. CIRP Annals*, 71(2):599–622, 2022.

- [7] F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S.L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H. O. Fabritius, S. Nikolov, M. Friák, N. Fujita, N. Grilli, K.G.F. Janssens, N. Jia, P.J.J. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand και D. Raabe. *DAMASK - The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale. Computational Materials Science*, 158:420–478, 2019.
- [8] Abolfazl Azarniya, Ali Karimi Taheri και Kouros Karimi Taheri. *Recent advances in ageing of 7xxx series aluminum alloys: A physical metallurgy perspective. Journal of Alloys and Compounds*, 781:945–983, 2019.
- [9] Evangelia Georgantzia, Michaela Gkantou και George S. Kamaris. *Aluminium alloys as structural material: A review of research. Engineering Structures*, 227:111372, 2021.
- [10] Alex Poznak, Daniel Freiberg και Paul Sanders. *Chapter 10 - Automotive Wrought Aluminium Alloys. Fundamentals of Aluminium Metallurgy* Roger N. Lumley, επιμελητής, Woodhead Publishing Series in Metals and Surface Engineering, σελίδες 333–386. Woodhead Publishing, 2018.
- [11] Kuruveri Udaya Bhat, Devadas Bhat Panemangalore, Spandana Bhat Kuruveri, Merbin John και Pradeep L. Menezes. *Surface Modification of 6xxx Series Aluminum Alloys. Coatings*, 12(2), 2022.
- [12] Marco Negrozio, Riccardo Pelaccia, Lorenzo Donati και Barbara Reggiani. *Simulation of the microstructure evolution during the extrusion of two industrial-scale AA6063 profiles. Journal of Manufacturing Processes*, 99:501–512, 2023.
- [13] Elwin L. Rooy. *Introduction to Aluminum and Aluminum Alloys. Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials*. ASM International, 1990.
- [14] G.E. Dieter. *Mechanical Metallurgy*. McGraw-Hill series in materials science and engineering. McGraw-Hill, 1986.

- [15] D.J Chakrabarti και David E Laughlin. *Phase relations and precipitation in Al-Mg-Si alloys with Cu additions. Progress in Materials Science*, 49(3):389–410, 2004. Α Φεστοςηριφτ ιν Ηονορ οφ Τ. Β. Μασσαλοκι.
- [16] Prantik Mukhopadhyay. *Alloy designation, processing, and use of AA6XXX series aluminium alloys. International Scholarly Research Notices*, 2012, 2012.
- [17] Juan Asensio-Lozano, Beatriz Suárez-Peña και George F. Vander Voort. *Effect of Processing Steps on the Mechanical Properties and Surface Appearance of 6063 Aluminium Extruded Products. Materials*, 7(6):4224–4242, 2014.
- [18] M. Khadyko, C.D. Marioara, S. Dumoulin, T. Børvik και O.S. Hopperstad. *Effects of heat-treatment on the plastic anisotropy of extruded aluminium alloy AA6063. Materials Science and Engineering: A*, 708:208–221, 2017.
- [19] Γρηγόρης Ν. Χαϊδεμενόπουλος. *Φυσική Μεταλλουργία*. Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2020.
- [20] Khanh Nguyen, Meijuan Zhang, Víctor Jesús Amores, Miguel A. Sanz και Francisco J. Montáns. *Computational Modeling of Dislocation Slip Mechanisms in Crystal Plasticity: A Short Review. Crystals*, 11(1), 2021.
- [21] C. Reuber, P. Eisenlohr, F. Roters και D. Raabe. *Dislocation density distribution around an indent in single-crystalline nickel: Comparing nonlocal crystal plasticity finite-element predictions with experiments. Acta Materialia*, 71:333–348, 2014.
- [22] A Acharya, J.L Bassani και A Beaudoin. *Geometrically necessary dislocations, hardening, and a simple gradient theory of crystal plasticity. Scripta Materialia*, 48(2):167–172, 2003.
- [23] D. Hull και D.J. Bacon. *Introduction to Dislocations (Fifth Edition)*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 5η έκδοση, 2011.
- [24] Γεώργιος Τριανταφυλλίδης. *Μεταλλογνωσία*. Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 3η έκδοση, 2016.

- [25] Henry R. Piehler. *Crystal-Plasticity Fundamentals. Fundamentals of Modeling for Metals Processing*. ASM International, 2009.
- [26] Zhaofei Xu, Cunsheng Zhang, Kuizhao Wang, Kai Zhang, Guoqun Zhao και Liang Chen. *Crystal plasticity prediction of texture evolution during helical extrusion process of aluminium alloys under three-dimensional deformation path*. *Journal of Alloys and Compounds*, 830:154598, 2020.
- [27] Lakhwinder Singh, Sanjay Vohra και Manu Sharma. *Investigation of strain rate behavior of aluminium and AA2024 using crystal plasticity*. *Materials Today: Proceedings*, 50:2345-2350, 2022. 2^οδ Ιντερνατιοναλ δὲνφερενσε ον Φυνκτιοναλ Ματεριαλ, Μανυφαστυρινγ ανδ Περφορμανςες (Γ^οΦΜΜΠ-2021).
- [28] Fengbo Han, Franz Roters και Dierk Raabe. *Microstructure-based multiscale modeling of large strain plastic deformation by coupling a full-field crystal plasticity-spectral solver with an implicit finite element solver*. *International Journal of Plasticity*, 125:97-117, 2020.
- [29] Geoffrey Ingram Taylor. *Plastic strain in metals*. *our. Inst. Metals.*, 62:307-324, 1938.
- [30] J.F.W. Bishop και R. Hill. *CXXVIII. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face-centred metal*. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 42(334):1298-1307, 1951.
- [31] Mohammadreza Yaghoobi, Sriram Ganesan, Srihari Sundar, Aaditya Lakshmanan, Shiva Rudraraju, John E. Allison και Veera Sundararaghavan. *PRISMS-Plasticity: An open-source crystal plasticity finite element software*. *Computational Materials Science*, 169:109078, 2019.
- [32] Romain Quey και Matthew Kasemer. *The neper/fepx project: free/open-source polycrystal generation, deformation simulation, and post-processing*. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, τόμος 1249, σελίδα 012021. IOP Publishing, 2022.

- [33] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler και D. Raabe. *Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. Acta Materialia*, 58(4):1152–1211, 2010.
- [34] Christoph Kords και Dierk Raabe. *On the role of dislocation transport in the constitutive description of crystal plasticity*. epubli GmbH Berlin, 2013.
- [35] Franz Roters, Philip Eisenlohr, Thomas R Bieler και Dierk Raabe. *Crystal plasticity finite element methods: in materials science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- [36] K.S. Thorne και R.D. Blandford. *Modern Classical Physics: Optics, Fluids, Plasmas, Elasticity, Relativity, and Statistical Physics*. Princeton University Press, 2017.
- [37] Otto T. Bruhns. *History of Plasticity*, σελίδες 1–61. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2018.
- [38] H. Mecking και U.F. Kocks. *Kinetics of flow and strain-hardening. Acta Metallurgica*, 29(11):1865–1875, 1981.
- [39] A. Ma και F. Roters. *A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. Acta Materialia*, 52(12):3603–3612, 2004.
- [40] A. Ma, F. Roters και D. Raabe. *A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations. Acta Materialia*, 54(8):2169–2179, 2006.
- [41] A. Ma, F. Roters και D. Raabe. *On the consideration of interactions between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling - Theory, experiments, and simulations. Acta Materialia*, 54(8):2181–2194, 2006.
- [42] EGON Orowan. *Problems of plastic gliding. Proceedings of the Physical Society*, 52(1):8, 1940.

- [43] Pratheek Shanthraj, Martin Diehl, Philip Eisenlohr, Franz Roters και Dierk Raabe. *Spectral Solvers for Crystal Plasticity and Multi-physics Simulations*, σελίδες 1347–1372. Springer Singapore, Singapore, 2019.
- [44] Wing Kam Liu, Shaofan Li και Harold S Park. *Eighty years of the finite element method: Birth, evolution, and future*. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(6):4431–4453, 2022.
- [45] Herve Moulinec και Pierre Suquet. *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites*. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II. Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 1994.
- [46] H. Moulinec και P. Suquet. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157(1):69–94, 1998.
- [47] Ricardo A. Lebensohn, Anand K. Kanjarla και Philip Eisenlohr. *An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials*. *International Journal of Plasticity*, 32-33:59–69, 2012.
- [48] F. Grennerat, M. Montagnat, O. Castelnau, P. Vacher, H. Moulinec, P. Suquet και P. Duval. *Experimental characterization of the intragranular strain field in columnar ice during transient creep*. *Acta Materialia*, 60(8):3655–3666, 2012.
- [49] X Ma, KK Parvathaneni, SV Lomov, D Vasiukov, M Shakoor και CH Park. *Quantitative comparison between fast Fourier transform and finite element method for micromechanical modeling of composite*. *FiBreMOD conference*, 2019.
- [50] A Prakash και R A Lebensohn. *Simulation of micromechanical behavior of polycrystals: finite elements versus fast Fourier transforms*. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(6):064010, 2009.
- [51] B Liu, D Raabe, F Roters, P Eisenlohr και R A Lebensohn. *Comparison of finite element and fast Fourier transform crystal plasticity solvers for texture*

- prediction. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(8):085005, 2010.
- [52] Christian Gierden, Julian Kochmann, Johanna Waimann, Bob Svendsen και Stefanie Reese. *A review of FE-FFT-based two-scale methods for computational modeling of microstructure evolution and macroscopic material behavior. Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(6):4115–4135, 2022.
- [53] P. Eisenlohr, M. Diehl, R.A. Lebensohn και F. Roters. *A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. International Journal of Plasticity*, 46:37–53, 2013. Μικροορυςτυρε-βασεδ Μοδελς οφ Πλαστις Δεφορματιον.
- [54] P. Shanthraj, P. Eisenlohr, M. Diehl και F. Roters. *Numerically robust spectral methods for crystal plasticity simulations of heterogeneous materials. International Journal of Plasticity*, 66:31–45, 2015. Πλαστιςτυ οφ Τεξτυρεδ Πολυςρψσταλς Iv Hovop οφ Προφ. Παυλ άν Ηουπτε.
- [55] Swantje Bargmann, Benjamin Klusemann, Jürgen Markmann, Jan Eike Schnabel, Konrad Schneider, Celal Soyarslan και Jana Wilmers. *Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review. Progress in Materials Science*, 96:322–384, 2018.
- [56] Ramin Bostanabad, Yichi Zhang, Xiaolin Li, Tucker Kearney, L. Catherine Brinson, Daniel W. Apley, Wing Kam Liu και Wei Chen. *Computational microstructure characterization and reconstruction: Review of the state-of-the-art techniques. Progress in Materials Science*, 95:1–41, 2018.
- [57] B Beausir και JJ Funderberger. *Analysis Tools for Electron and X-ray diffraction. ATEX-software, www.atex-software.eu, Université de Lorraine-Metz*, 201(7), 2017.
- [58] L. Kubin, B. Devincre και T. Hoc. *Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. Acta Materialia*, 56(20):6040–6049, 2008.

- [59] Ronan Madec και Ladislav P. Kubin. *Dislocation strengthening in FCC metals and in BCC metals at high temperatures. Acta Materialia*, 126:166–173, 2017.
- [60] S Dumoulin, O Engler, O S Hopperstad και O G Lademo. *Description of plastic anisotropy in AA6063-T6 using the crystal plasticity finite element method. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(5):055008, 2012.
- [61] Alireza Dashti, Mohammad Hossein Shaeri, Reza Taghiabadi, Faramarz Djanroodi, Farzaneh Vali Ghazvini και Hamid Javadi. *Microstructure, texture, electrical and mechanical properties of AA-6063 processed by multi directional forging. Materials*, 11(12):2419, 2018.
- [62] K. Sedighiani, M. Diehl, K. Traka, F. Roters, J. Sietsma και D. Raabe. *An efficient and robust approach to determine material parameters of crystal plasticity constitutive laws from macro-scale stress-strain curves. International Journal of Plasticity*, 134:102779, 2020.
- [63] Karo Sedighiani, Konstantina Traka, Franz Roters, Dierk Raabe, Jilt Sietsma και Martin Diehl. *Determination and analysis of the constitutive parameters of temperature-dependent dislocation-density-based crystal plasticity models. Mechanics of Materials*, 164:104117, 2022.
- [64] Xu Zhang, Jianfeng Zhao, Guozheng Kang και Michael Zaiser. *Geometrically necessary dislocations and related kinematic hardening in gradient grained materials: A nonlocal crystal plasticity study. International Journal of Plasticity*, 163:103553, 2023.
- [65] Daniel Blaschke, Leonid Burakovsky και Dean Laverne Preston. *On the temperature and density dependence of dislocation drag from phonon wind. Journal of Applied Physics*, 130(1), 2021.
- [66] Martin Diehl, Michael Groeber, Christian Haase, Dmitri A Molodov, Franz Roters και Dierk Raabe. *Identifying structure-property relationships through DREAM. 3D representative volume elements and DAMASK crystal plasticity si-*

mulations: an integrated computational materials engineering approach. Jom,
69:848–855, 2017.