# شبیهسازی تغییرات ریزساختار آلومینیوم ۲۰۵۱ در فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار با استفاده از روش مونت کارلو<sup>\*</sup>

منصوره طاهري() محمدرضا ابوطالبي ) سيد حسين سيدين ) باقر محمدصادقي

#### چکیدہ

یکی از مهمترین فرایندهای تغییرشکل پلاستیک شدید، فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار است. این روش دارای مزایای زیادی از جمله ریزدانگی بسیار شدید است. در این پژوهش، فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار آلیاژ آلومینیوم ۲۰۱۱ توسط نـرمافزار آباکوس شبیهسازی و توزیع کرنش در نمونه استخراج شد. سپس ریزساختار نمونه آنیل شده پس از فشردن در کانالهای هـممقطع زاویهدار، توسط روش مونت کارلو، در محیط نرمافزار متلب، شبیهسازی و متوسط اندازه دانه نهایی پیشربینی گردید. نتایج شبیهسازیها نشان میدهد که با افزایش ناهمگنی توزیع کرنش در سطح نمونه فشرده شده در کانالهای هممقطع زاویهدار، ناهمگنی اندازه دانه ها در ریزساختار نهایی پس از آنیل نیز بیشتر خواهد شد. همچنین، با افزایش زاویه کانال قالب، متوسط اندازه دانه نهایی پس از آنیل افزایش مییابد.

**واژههای کلیدی** آلیاژ آلومینیوم ۲۰۶۱، *فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار*، اجزاء محدود، مونت کارلو، اندازه دانه.

## Simulation of the Microstructural Evolution of AA6061 in Equal Channel Angular Pressing Using Monte Carlo Method

M. Taheri M. R. Aboutalbei S. H. Seyedein B. M. Sadeghi

#### Abstract

Equal channel angular pressing (ECAP) is one the most important severe plastic deformation techniques with many privileges such as extensive grain refinement. In the present study, the ECAP process of AA6061 is simulated using ABAQUS software and the strain distribution is evaluated. The microstructure of the pressed sample after annealing is predicted and the average grain size is calculated using Monte Carlo algorithm with the aid of MATLAB software. The results indicate that as the strain inhomogeneity increases, the grain structure uniformity after annealing treatment reduces. Moreover, as the channel intersection angle increases, the average grain size is enhanced.

Keywords AA6061; ECAP; Monte Carlo; Grain size; FEA.

DOI:10.22067/ma.v28i1.32927

<sup>\*</sup>نسخهٔ نخست مقاله در تاریخ ۹۲/۱۲/۱۱ و نسخهٔ پایانی آن در تاریخ ۹٥/۳/۲۲ به دفتر نشریه رسیده است.

<sup>(</sup>۱) دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه علم و صنعت ایران.

<sup>(</sup>۲) نویسنده مسئول: استاد، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه علم و صنعت ایران. mrezab@iust.ac.ir

<sup>(</sup>۳) استاد ، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه علم و صنعت ایران.

<sup>(</sup>٤)استادیار، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه علم و صنعت ایران.

گرفتهاند. اما امروزه گرایش به شبیه سازی های کامپیوتری برای پیش بینی تغییرات ریز ساختاری با سرعت در حال افزایش است. کاربرد شبیه سازی کامپیوتری با استفاده از روش های عددی جهت مدل-سازی رشد دانه و تبلور مجدد از اوایل سال ۱۹۸۰ شروع شد. روش های عددی رایج مورد استفاده عبارتند از؛ (۱) روش ورتکس، (۲) مدل زمینه فازی، (۳) روش اتوماتیک سلولی، (٤) مدل مونت کارلو [3].

یکی از رایجترین روش های عددی برای مدل کردن تبلور مجدد که در دو دهه اخیر مورد توجه قرار گرفته است، روش های مبتنی بر روش مونت کارلو می باشد. در سال ۱۹۸۳ اولین تحقیق با استفاده از مدل مونت کارلو در زمینه پیش بینی رشد دانه توسط اسرولویتز و همکارانش ارائه گردید [4].

از سال ۱۹۸۳ تاکنون تحقیقات زیادی توسط محققین مختلف جهت شبیهسازی تبلور مجدد و رشد دانه توسط مدل مونت كارلو صورت پذيرفته است -5] [18. تحقیقات انجام شده در راستای شـبیهسـازی دو و سه بعدی رشد دانه به صورت نرمال، غیر نرمال و رشد دانه در حضور رسوبات ریز می باشد. در مجموعه تحقیقاتی که تاکنون انجام شده سعی گردیده جهت تطبيق نتايج حاصل از مدل با شرايط واقعى رشـد دانـه، این مدل اصلاح شود. نتایج بررسی ها نشان میدهد که سینتیک و نحوه هندسی رشد دانه در شبیهسازی رشـد دانه با استفاده از این مدل با شرایط واقعی مطابقت دارد. در تحقیقات زیادی که بر روی پدیده تبلور مجدد انجام گرفته، فرض شده است که عامل محرک برای تبلور مجدد، یعنی انرژی ذخیره شده، ناشی از تغییرشکل همگن می باشد. به این منظور مقدار انرژی ذخیره شده توسط نابجاییها بطور یکنواخت و با یک ضریبی از انرژی مرزدانه در ماده فرض گردیده است [17]. اما شرايط واقعى فرايند به همراه شكل هندسي قطعه كار اغلب منجر به توزیع ناهمگن انرژی ذخیره شده و در نتیجه منجر به جوانهزنی در مکان های خاص (توزیع غیر تصادفی) درون قطعهکار خواهد شد، به عنوان مثال

سال بیست و هشتم، شماره یک، ۱۳۹۵

مقدمه

امروزه روش های تغییر شکل پلاستیک شدید با سرعت زیادی در حال گسترش بوده و بسیاری از آنها در مرحله گذر از حالت آزمایشگاهی به صنعتی میباشند. این روشها توانایی تولید آلیاژهای دارای ساختار بسیار ریز در مقیاس نانومتر را فراهم ساختهاند. یکی از مهم-ترین فرایندهای تغییرشکل پلاستیک شدید، فشردن در كانالهاي هم مقطع زاويهدار (equal channel - ECAP angular pressing) مىباشد. از مهمترين مزيتهاى فرايند ECAP، ايجاد برش ساده تقريباً يكنواخت، شديد و زاویهدار درحجم بیلت میباشد. این مزیت یک نقش کلیدی را در تکامل ساختار برای کرنشهای بزرگ ایفا مینماید. به این صورت که تنشهای برشی بوجود آمده در ماده باعث بالا رفتن چگالی نابجاییها در آن می شود. این نابجایی ها، مرزدانه هایی با زاویه کوچک را تشکیل میدهند که در نهایت با تبدیل شدن به مرزدانههای با زاویه بزرگ، ردیفهایی از دانههای ریز را بوجود می آورند. کوچک شدن اندازه دانهها موجب بالا رفتن خواص مکانیکی و سوپرپلاستیکی مواد می شود. از دیگر مزایای مهم این روش، تکرارپذیر بودن آن است که در این صورت امکان رسیدن به اندازه دانههای بسیار ریز میسر میگردد [1].

همان طور که گفته شد، در حین فرایند تغییر شکل، خواص مکانیکی مواد به صورت گسترده ای تغییر میکند. ماده تغییر شکل یافته از لحاظ ریز ساختاری، ریز دانه شده و مقدار زیادی انرژی کرنشی در آن ذخیره می شود. در صورتیکه پس از تغییر شکل، ماده در دمای بالایی حرارت داده شود (آنیل شود)، فرایندهای فعال شده حرارتی، مکانیز مهایی را فراهم می آورد که می تواند باعث حذف عیوب یا آرایش دیگری با انرژی کمتر شود. دو فرایند اصلی برای ترمیم ریز ساختار وجود دارد: بازیابی و تبلور مجدد. این فرایندها با دما فعال می شوند و در دو نوع استاتیکی و دینامیکی رخ می دهند [2].

فرایندهای بازیابی و تبلور مجدد بطور گستردهای در آزمایشگاههای تحقیقاتی مورد بررسی و تحقیق قـرار در مورد اکستروژن برای تولید پروفیلهای آلومینیوم. بنابراین، تهیه الگوریتمی برای محاسبه توزیع اندازه دانه در آلیاژ تغییرشکل یافته ناهمگن و سپس تبلور مجدد یافته ضروری می باشد. در میان تحقیقات انجام شده جهت شبیه سازی ریز ساختار تبلور مجدد یافته به و سیله مدل مونت کارلو فقط چند محقق انرژی ذخیره شده تو سط نابجایی ها را در ماده بطور غیر همگن در نظر گرفته اند [6,16,18].

تاکنون تحقیقات تئوری و آزمایشگاهی زیادی بر روی فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار و تاثیر پارامترهای مختلف بر آن انجام شده است، اما، به دلیل پیچیدگی مکانیزم و پدیدههای ناشناخته مربوط به تکامل ریزساختاری، بررسیهای اندکی در مورد تاثیر این پارامترها بر پالایش ریزساختار صورت گرفته است. بنابراین، در اینباره به مطالعات بیشتری نیاز میباشد [19].

با توجه به مطالبی که ذکر شد، این پژوهش با دو هدف کلی صورت گرفته است: در مرحله اول فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار آلیاژ آلومینیوم ۲۰٦۱ توسط نرمافزار اجزاء محدود آباکوس (ABAQUS) شبیهسازی شده و تاثیر برخی پارامترهای فرایند در آن مورد بررسی قرار گرفته است. در مرحله بعد، ریزساختار نمونه فشرده شده در کانالهای هممقطع زاویهدار پس از آنیل توسط روش مونت کارلو شبیهسازی شده و متوسط اندازه دانه نهایی پیشبینی میشود. به این منظور، از مرتبط کردن دو روش اجزاء محدود در محاسبه توزیع کرنش و مونت کارلو جهت پیشبینی اندازه دانه است.

### روش تحقيق

در این بخش یک مدل و راه حل تئوری جامع ارائه خواهد شد که در آن پس از تعیین توزیع کرنش در نمونه فشرده شده در کانالهای هممقطع زاویهدار توسط شبیهسازی اجزاء محدود، توزیع انرژی ذخیره شده ناشی از تغییرشکل محاسبه شده و در ادامه ریزساختار و توزیع اندازه دانه در نمونه بعد از آنیل تعیین میشود.

این راه حل شامل کوپل روش اجزاء محدود و مونت کارلو می باشد. روندنمای کلی مدل ارائه شده در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱ روندنمای کلی مدل ارائه شده

شبیه سازی اجزاء محدود فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویه دار. شبیه سازی توسط نرم افزار ABAQUS/Explicit و به صورت سه بعدی انجام شد. در این راستا مجموعه سنبه و قالب به صورت صلب گسسته (Discrete Rigid) و بیلت به صورت انعطاف-پذیر (Deformable) در نظر گرفته شد.

قالب فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویه دار با مقطع ۱۲×۱۶ میلیمتر مربع، زاویه کانال ۹۰ درجه و زاویه گوشه ۳۰ درجه و نیز نمونهای با مقطع ۱۲×۱۶ میلیمتر مربع و طول ۲٦ میلیمتر طراحی شد. شکل (۲)، قالبهای رسم شده در نرمافزار را نشان می دهد که به ترتیب از چپ به راست دارای زوایای کانال ۹۰، ۱۲۰ و ۱۳۵ درجه می باشند.



شکل ۲ قالبهای فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار طراحی شده در نرمافزار آباکوس

در این شبیهسازی مقدار ضریب اصطکاک ۰/۰**٦۵** در نظر گرفته شد. علاوه بر این، سرعت حرکت سنبه یک میلیمتر بر ثانیه در نظر گرفته شد.

در ادامه به منظور شبیه سازی فرایند فشردن در کانال های هم مقطع زاویه دار در پاس دوم، با کپی کردن مدل پاس اول و جابجایی قالب و سنبه در ماژول Assembly و همچنین عوض کردن شرایط مرزی در ماژول Load شرایط مسیر B<sub>C</sub>، پیاده سازی شد. لازم به ذکر است که در پاس دوم در ماژول Load، شرط اولیه هم تعریف شد.

محاسبه انرژی ذخیره شده در نواحی مختلف نمونه فشرده شده در کانالهای هم مقطع زاویه دار. همانطور که گفته شد، تغییر شکل پلاستیکی شدید، یک ساختار زیردانه با دانسیته نابجایی بالا در ماده بوجود می آورد [20]. انرژی ذخیره شده ناشی از کارسرد بر واحد حجم، H، از رابطه زیر محاسبه می شود [19,20]: H =  $\frac{2\gamma}{D}$ 

که در این رابطه D متوسط اندازه زیردانه و *۲* انرژی بر واحد سطح یک مرز زیردانه است که در مرتبه ۰/۰ ژول بر متر مربع میباشد. باید ذکر نمود که اندازه زیردانه با افزایش کرنش کاهش مییابد و گیل سویلانو و همکاران [21]، رابطه زیر را با انجام تست بر روی فلزات مختلف بدست آوردهاند:

 $\mathbf{D} = \left(3.5 + 1.7\varepsilon^{-1}\right) \times 10^{-7} \tag{(Y)}$ 

که در این رابطه D بر حسب متر می باشد. از آنجایی که در فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویه دار، توزیع کرنش در طول نمونه یکنواخت نمی-باشد (حداقل در پاسهای اولیه)، بنابراین انرژی ذخیره شده نیز متناسب با آن یکنواخت نمی باشد. برای محاسبه انرژی در نقاط مختلف، سطح مقطع نمونه به ۱۰ منطقه مساوی تقسیم، و در هر منطقه متوسط مقدار کرنش اعمالی محاسبه شد. در واقع فرض شد که در هر

منطقه تغییر شکل همگن می باشد. در ادامه میزان انرژی ذخیره شده در هر منطقه توسط روابط مذکور محاسبه شد. قبل از انجام شبیه سازی تبلور مجدد توسط مدل مونت کارلو، باید انرژی ذخیره شده را به همه مکان های شبکه ورودی اولیه به مدل اعمال نمود.

پیش بینی ریز ساختار نهایی توسط مدل مونت کارلو تبلور مجدد و رشد دانه. جهت شبیه سازی ریز ساختار نمونه فشرده شده در کانال های هم مقطع زاویه دار پس از آنیل، از یک مدل مونت کارلو دو بعدی تبلور مجدد و رشد دانه استفاده شد. این مدل در محیط برنامه نویسی نرمافزار متلب (MATLAB) پیاده سازی شد. در این راستا، یک شبکه دو بعدی مربعی با ابعاد ۱۰۰×۱۰۰ مکان در نظر گرفته شد.

سپس به هر مکان از شبکه یک عدد تصادفی [.,Q<sub>u</sub>] Si[1,Q<sub>u</sub>] نسبت داده شد که نشان دهنده جهت هر دانه است. عدد <sub>u</sub>Q برابر ۸۸ انتخاب گردید، طبق مطالعات انجام شده این عدد قابلیت ایجاد رشد نرمال دانه را دارد[14,13,9]. شایان ذکر است مکانهای دارای Si متفاوت، مربوط به دانههای مختلف میباشند. برای ایجاد ریزساختار اولیه مناسب قبل از تبلور مجدد، شبکه باید، علاوه بر انرژی ذخیره شده در بخش قبل، دارای اندازه اولیه مناسب نیز باشد. همچنین باید دانسیته محاسبه و در شبکه اعمال گردد. روشهای مناسب استفاده برای آمادهسازی شبکه اولیه مناسب و همچنین الگوریتم مونت کارلو پیادهسازی شده در ادامه توضیح داده شده است.

تولید شبکه اولیه با متوسط اندازه دانه مناسب. متوسط اندازه دانه آلیاژ آلومینیوم ۲۰۶۱ پس از انجام فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویهدار در پاس اول در حدود ۱۸ میکرومتر و در پاس دوم حدود ۰/۰ میکرومتر می باشد [22]. برای ایجاد اندازه دانه مناسب می بایست از الگوریتم رشد نرمال دانه مونت کارلو استفاده نمود [13,14]. روندنمای الگوریتم رشد نرمال دانه در روش مونت کارلو مورد استفاده در شکل (۳) نشان داده شده است.



شکل ۳ روندنمای الگوریتم رشد نرمال دانه در روش مونت کارلو

مورد استفاده

هنگامی که ۱۰۰×۱۰۰ مرتبه مراحل فوق (به عبارت دیگر تغییر جهت) انجام پذیرد، یک گام مونت کارلو (MCS) انجام شده که واحد زمانی شبیهسازی میباشد. پس از اتمام هر گام، شبکه حاصل مورد آنالیز قرار گرفته و متوسط اندازه دانه در آن محاسبه می شود. الگوریتم فوق تا زمان دستیابی به متوسط اندازه دانه مورد نیاز، تکرار می شود.

همانطور که قبلا گفته شد، جهت پیشبینی ریزساختار حاصل از آنیل میبایست توزیع انرژی ذخیره شده مورد محاسبه از روش مذکور به شبکه مونت کارلو منتقل گردد. بنابراین، در این مرحله، شبکه مونت کارلو نیز به ۱۰ منطقه تقسیم شد که هر یک شامل ۱۰ ردیف ۱۰۰ مکانی، یعنی ۱۰۰۰ مکان میباشد.

سپس به هر یک از مکانهای یک منطقه، انرژی داخلی مطابق با آنچه قبلاً ذکر شد محاسبه گردیده، تخصیص داده می شود. از شبکه حاصل به عنوان ورودی الگوریتم تبلور مجدد مونت کارلو استفاده شد.

مدل جوانهزنی. حال پس از انتقال توزیع انرژی ذخیره شده به شبکه مونت کارلو، شبیه سازی جوانه ها مطابق انرژی هر منطقه انجام می گیرد. از آنجایی که جوانهزنی با حرکت نابجایی ها، که فرایندی فعال شونده با دما است، روی می دهد، دانسیته جوانهزنی را می توان براساس رابطه ای بیان نمود که از یک عبارت برای نرخ ثابت فرایند، یک عبارت برای عامل محرک و یک عبارت نمایی متشکل از انرژی اکتیواسیون، تشکیل شده است [16]:

$$\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{C}_{o} \left( \mathbf{E}_{D} - \mathbf{E}_{C}^{D} \right) \exp\left(\frac{-\mathbf{Q}_{N}}{kT}\right)$$
(Y)

که در آن  $C_0$  عبارت ثابت،  $E_D$  انرژی ذخیره شده،  $E_c^D$  انرژی ذخیره شده، بحرانی که در مقادیر کمتر از آن جوانهزنی رخ نمی دهد،  $Q_N$  انرژی اکتیواسیون برای جوانهزنی و T دمای آنیل میباشد. از آنجایی که در نمونه فشرده شده در کانالهای هممقطع زاویهدار، انرژی ذخیره شده در منطقه محاسبه شده یکنواخت نبوده، بنابراین دانسیته جوانهزنی نیز در هر ناحیه متفاوت خواهد بود. مقدار انرژی اکتیواسیون برای آلیاژ آلومینیوم ۲۰۲۱ برابر با ۱۰۰ کیلوژول بر مول میباشد [23].

شایان ذکر است که در اینجا، از کاهش انرژی مربوط به بازیابی در ابتدای آنیل صرف نظر شده است. در واقع فرض شده است که در فرایند آنیل، نرخ گرم شدن به اندازهای زیاد بوده که فرصت بازیابی از فلز گرفته شده است بنابراین رابطه مربوط به دانسیته جوانهزنی به صورت غیر وابسته به زمان می باشد. محاسبه دانسیته جوانه ها برای هر منطقه از شبکه مونت کارلو مطابق روابط ذکر شده میباشد. جهت ایجاد جوانه ها، به ازای هر جوانه، یک مکان از شبکه به طور تصادفی انتخاب و یک عدد تصادفی در بازه ٤٩ تا ٢٤ به آن نسبت داده شد تا آن مکان بعنوان جوانه بدون انرژی داخلی درنظر گرفته شود و مقدار انرژی ذخیره شده آن مکان مربوط به جوانه، صفر در نظر گرفته شود [9,24,25].

پس از مرحله فوق، الگوریتم رشد دانه مونت کارلو به شبکه جوانهریزی شده، اعمال گردید. روندنمای این الگوریتم همانند شکل (۳) می باشد، با این تفاوت که:

۱- در محاسبه انرژی هر مکان علاوه بر در نظر گرفتن
 انـرژی مرزدانـهها، انـرژی ذخیـره شـده ناشـی از
 تغییرشکل هر مکان نیز منظور گشته و از رابطه زیر
 محاسبه شد [9,16,18]:

$$E_{i} = J \sum_{j=1}^{n} \left( 1 - d_{s_{i}s_{j}} \right) + H_{i}f\left(Q_{u} - S_{i}\right)$$
(£)

در این رابطه J انرژی مرزدانه است که بر واحـد سطح گزارش می شود.  $(\mathbf{P}_u - \mathbf{S}_i)$  تابع پلهای اسـت کـه در شرایط  $\mathbf{S}_i$  و  $\mathbf{Q}_u = \mathbf{S}_i$  برابر بـا صفر است و  $\mathbf{Q}_u = \mathbf{S}_i$  برابر بـا ٤٨ بـوده کـه تعـداد جهـات دانههای اولیه تبلور مجدد نیافتـه مـیباشـد. H<sub>i</sub> مقـدار ثابت مثبتی است که بیانگر انرژی ذخیره شده هر مکـان از شبکه میباشد و مقدار آن از رابطه انرژی ذخیره شده مذکور و بـا توجـه بـه مقیـاس طـولی شـبکه محاسـبه میشود[15,25].

۲- از تغییر جهتهایی که منجر به تبدیل دانه تبلور مجدد یافته به دانه تبلور مجدد نیافته می شود، مجدد یافته می شود، جلوگیری به عمل آمد. به این منظور، در صورتی که مکان انتخابی جز مکانهای تبلور مجدد نیافته باشد (<sub>u</sub>Q ≥ Q)، مجاز به تغییر جهت به کلیه همسایهها می باشد. در حالتی که تغییر جهت به شود، یکی از همسایههای تبلور مجدد یافته پذیرفته شود، رشد دانه تبلور مجدد یافته به درون دانه تبلور مجدد یافته به تبلور

مدل مونت کارلو جهت شبیهسازی تبلور مجدد و رشد دانه. روندنمای شبیهسازی تبلور مجدد با استفاده از روش مونت کارلو در شکل(٤) نشان داده شده است.

٤٢



شکل ٤ روندنمای شبیهسازی تبلور مجدد با استفاده از روش مونت کارلو

شبکه اولیه ورودی به حلقه اصلی برنامه، شبکهای با ابعاد ۱۰۰×۱۰۰ با متوسط اندازه دانه ۰/۰ میکرومتر میباشد که جهتگیری دانهها عددی بین ۱ تا ٤٨ است. همچنین به هر مکان از شبکه، یک انرژی داخلی ناشی از تغییر شکل نیز اختصاص داده شده است. از آنجایی که متوسط اندازه دانه اولیه ۰/۰ میکرومتر میباشد، بنابراین در اینجا، اندازه هر مکان از شبکه برابر با ۲۰/۰ میکرومتر فرض شد. بنابراین با یک شبکه ۲۰۰×۱۰۰، سطح ۲۵ میکرومتر مربع را میتوان شبیهسازی نمود.

برای الگوریتم جوانهزنی از مدل سرعت ثابت استفاده شد. در این مدل، همانطور که قبلا توضیح داده شده، تمامی جوانهها در ابتدای آنیل اعمال میشود. در واقع برای بعضی از مواد، دانسیته جوانهزنی از ابتدای شروع آن ممکن است بسیار سریع کاهش یافته و به صفر برسد، بهطوری که میتوان فرض نمود تمام جوانهها در لحظه شروع تبلور مجدد ایجاد شده و پس از آن هیچگونه جوانهزنی صورت نمی گیرد [2]. مجدد نیافته رخ داده است (که با کاهش انرژی ذخیره شده همراه است)، و در حالتی که تغییر جهت به یکی از همسایه های تبلور مجدد نیافته پذیرفته شود، رشد دانه عادی رخ داده است (که با کاهش انرژی مرزدانه همراه است). اما در صورتی که مکان انتخابی جز مکانهای تبلور مجدد یافته باشد (Q > Q<sub>u</sub>)، تنها مجاز به تغییر جهت به یکی از همسایه های تبلور مجدد یافته می باشد.

نتايج و تفسير آنها

*نتایج شبیه سازی های نمونه تحت فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویه دار.* اولین شبیه سازی فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویه دار بر روی آلیاژ آلومینیوم ۲۰۳۱ در قالبی با زاویه کانال ۹۰ درجه و زاویه گوشه ۳۰ درجه، در دمای محیط و برای یک زاویه گوشه ۳۰ درجه، در دمای محیط و برای یک پاس، در نرمافزار آباکوس صورت پذیرفت (Casel). سایر پارامترهای اتخاذ شده در جدول (۱) نشان داده شده است. در فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویه داد بر روی آلیاژ زاویه گوشه ۹۰ درجه، در دمای محیط و برای یک زاویه گوشه ۹۰ درجه، در دمای محیط و برای یک زاویه گوشه ۹۰ درجه، در دمای محیط و برای یک زاویه گوشه ۹۰ درجه، در دمای محیط و برای یک مایر پارامترهای اتخاذ شده در جدول (۱) نشان داده شده است. در فرایند فشردن در کانالهای هممقطع تاویه داد، بدلیل تغییر شکلهای زیاد و کرنش بالا در زاویه در دمای محیط، المانها دچار اعوجاج و به هم می موجد. این موضوع در شکل (۵ – الف) نشان داده می نمود. این موضوع در شکل (۵ – الف) نشان داده شده است.

رابطه تنش کرنش از روابط فشار گرم در دماهای مورد استفاده در شبیهسازی و چندین نرخ کرنش استخراج شده است و به نرمافزار داده شده است. از آنجاکه نرمافزار اباکوس در مدول تعریف خواص خود مدلی از پیش تعریف شده همانند قانون جانسون – کوک یا زنر-هولومان ندارد و فقط بصورت نمودارهای تنش – کرنش وابسته به دما و نرخ کرنش داده می-پذیرد، دادههای تست فشار بصورت تنش و کرنش حقیقی و وابسته به دما و نرخ کرنش وارد محیط نرم-افزار شدند.

همانطور که مشاهده می شود، المان های سطحی دچار به هم ریختگی و اعوجاج شدهاند. بنابراین جهت

رفع این مشکل، از تکنیک ALE در شبیهسازی Case1 بهره گرفته شد که نتایج آن در شکل (۵ – ب) نشان داده شده است. در این حالت مشکل به هم ریختگی و اعوجاج بر طرف شده است.

جدول ۱ پارامترهای بهکار رفته در شبیهسازی توسط

نرم افزار اباكوس	
۱٤×۱٤×٦٦ mm <sup>3</sup>	ابعاد نمونه
NEXNE mm <sup>2</sup>	ابعاد مقطع كانال
۱ میلیمتر بر ثانیه	سرعت پرس
•/•٦٥	ضريب اصطكاك
١	اندازه مش استفاده شده
۲۷۰۰kg/m <sup>3</sup>	چگالی نمونه
79 GPa	مدول يانگ نمونه
• /٣٣	ضريب پواسون



شکل ۵ شبیه سازی Casel، الف) بدون استفاده از تکنیک ALE و ب) با استفاده از تکنیک ALE

نتایج شبیهسازیهای بعدی نشان میدهد که استفاده از این تکنیک بهمنظور شبیهسازی فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار فقط در قالب ۹۰ درجه (یا کمتر)، در دمای محیط، در پاسهای یک و بالاتر مورد نیاز است. در حالی که در موارد دیگر (دماهای بالاتر و پاسهای کاری بیشتر)، بدلیل کرنشهای اعمالی کمتـر و همچنین کم شـدن اثـر اصـطکاک سـطحی در دماهـای بالاتر، استفاده از تکنیک ALE مورد نیاز نمیباشد.

منظور از کاهش اثر اصطکاک با افزوده شدن دما، بهتر شدن روند سیلان ماده با فعال شده پدیدهای ترمیم همانند بازیابی و تبلور مجدد دینامیکی است. بعبارت دیگر با افزایش دما، روند کارسختی بدلیل فعال شدن مکانیزمهای کارنرمی آهسته و متوقف می شود و این باعث سیلان بهتر ماده درون قالب با نیروی کمتر می گردد و این مساله پدیده اعوجاج مش بندی را مرتفع می سازد.

شکل (٦)، تصاویری از توزیع کرنش نمونه در چهار زمان مختلف از شبیهسازی را نشان میدهد. با توجه به ابعاد نمونه و قالب و سرعت پرس، زمان مورد نیاز فرایند شبیهسازی، ٦٦ ثانیه میباشد.

همانطور که از شکل (٦) مشخص است، توزیع کرنش از بالا به پایین نمونه کاهش می یابد که علت آن را می توان به اختلاف سرعت المانهای سطوح بالا و پایین نمونه نسبت داد. به این معنی که المانهای سطوح بالایی باید با سرعت بیشتری نسبت به المانهای پایینی حرکت کنند تا هندسه تغییر شکل حفظ شود. در نتیجه میزان کرنش اعمالی در سطوح بالایی بیشتر می باشد. با توجه به شکل (٦)، مقدار کرنش موثر بطور تقریبی برابر با ١/١٦ می باشد. این مقدار با استفاده از رابطه تئوری ایواهاشی [26] به صورت زیر محاسبه می شود:

$$\overline{\varepsilon}_{n} = \frac{N}{\sqrt{3}} \left[ 2cot\left(\frac{\varphi + \psi}{2}\right) + \psi csc\left(\frac{\varphi + \psi}{2}\right) \right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \left[ 2cot\left(\frac{90 + 30}{2}\right) + \frac{\pi}{6}csc\left(\frac{90 + 30}{2}\right) \right] \quad (\varepsilon)$$

بنابراین تطابق نسبتاً خوبی بین نتایج حاصل از شبیهسازی و روابط تئوری وجود دارد که نشان از صحت شبیهسازی انجام شده میباشد. شایان ذکر

است که تفاوت بین نتایج شبیه سازی و محاسبات تئوری به تاثیر ترکیبی شرایط اصطکاکی و خواص مواد شامل کرنش سختی و جهات کریستالو گرافی نسبت داده می شود که در محاسبات تئوری در نظر گرفته نمی شود [27].



شکل ٦ توزیع کرنش در Case1 در الف) t=0s، ب) ب t=66s (پ) t=46.2s

نشریهٔ مهندسی متالورژی و مواد





شکل ۷ توزیع کرنش در نمونه شبیهسازی شده، الف) موقعیت خط در قطعه A-B ، ب) تغییرات کرنش در امتداد خط A-B.

تغییرات کرنش در راستای خط A-B در مقطع میانی نمونه در شکل (۷) نشان داده شده است. همانطور که از شکل (۷- الف) دیده می شود، تغییر شکل در راستای محور Z تغییر چندانی ندارد و تقریباً یکنواخت میباشد. بنابراین، راستای A-B برای نشان دادن توزیع کرنش بر حسب فاصله از سطح بالایی نمونه در این مقطع انتخاب شد. همانطور که در شکل (۷ – ب) مشاهده می شود، مقدار کرنش اعمالی روند کاهشی دارد، به گونهای که توزیع کرنش در ۲/٤ میانی تقریبا یکنواخت بوده و در ۱/٤ بالایی و پایینی غیر یکنواخت مي باشد. اين امر، همانطور كه قبلا نيز اشاره شد، احتمالا بدلیل اختلاف میدانهای سرعت در عرض نمونه است. شایان ذکر است که از منحنیهای کرنش بر حسب جابجایی بعنوان داده ورودی به الگوریتم مونت كارلو بهمنظور پیش بینی متوسط اندازه دانه نهایی نمونه آنیل شده پس از انجام فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار استفاده شده است.

نتایج شبیه سازی تبلور مجدد به روش مونت کارلو شبیه سازی ریز ساختار نمونه فشرده شده در کانال های هم مقطع زاویه دار پس از آنیل. به منظور شبیه سازی ریز ساختار نمونه فشرده شده در کانال های هم مقطع زاویه دار، از کرنش های به دست آمده تو سط شبیه سازی اجزاء محدود به عنوان ورودی برنامه مونت کارلو استفاده می شود.

برای اعمال مسیر کرنش به الگوریتم مونت کارلو، از تقریب تکهای-خطی آن استفاده می شود. به این منظور، همانطور که در قسمت قبل توضیح داده شد، سطح مقطع نمونه به ۱۰ منطقه تبدیل شده و برای هر منطقه، متوسط کرنش اعمالی محاسبه می شود. این کرنش ها در شکل (۸) به همراه نمودار کرنش اصلی نشان داده شده است.



شکل ۸ مسیر کرنش در سطح مقطع نمونه و تقریب تکه ای-خطی آن

تکامل ریزساختار پیش بینی شده طی تبلور مجدد در دمای ۲۲۳ کلوین پس از فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویه دار با کانال ۹۰ درجه در دو پاس در شکل (۹ – الف تا ح) نشان داده شده است. در این شکلها، به منظور تمایز بین جوانه یا دانه های تبلور مجدد یافته و دانه های تبلور مجدد نیافته، دانه های تبلور نیز با خطوط در شت ر نشان داده شده است.

همانطور که مشاهده می شود در مراحل اولیه، دانههای تبلور مجدد به صورت مجزا از یکدیگر رشد میکنند (شکل ۹ – الف تا پ). پس از آن، دانههای تبلور مجدد توسط یکدیگر احاطه می شوند (شکل ۹ (ت و ث)) و در نهایت، تبلور مجدد در کسر اندک نواحی تبلور مجدد نیافته رشد میکند (شکل ۹–ج). پس از اینکه تبلور مجدد کامل شد، دانههای تبلور که شبیهسازی مونت کارلو برای اکستروژن آلیاژ -Al 4.5Zn-1Mg انجام داد، همخوانی دارد [28].

در شکل (۱۰)، متوسط اندازه دانه ریزساختار نهایی پیش بینی شده در هر یک از مناطق دهگانه نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود، متوسط اندازه دانه در مناطق ۱ تا ۹ تقریبا یکنواخت بوده در حالیکه در منطقه ۱۰ (دورترین منطقه از سطح نمونه)، اندازه متوسط دانه رشد بیشتری داشته است. دلیل این امر این است که در منطقه ۱۰، به دلیل کرنش اعمالی کمتر • انرژی ذخیره شده در آن منطقه کمتر بوده و در نتيجه دانسيته جوانهزني آن نيز كمتر خواهد بود كه باعث می شود جوانه های تبلور مجدد ایجاد شده فرصت بیشتری برای رشد در نواحی تغییرشکل داشته باشند. این نتایج با [25]، که در آن به بررسی ناهمگنی ریزساختار نهایی سیم تخت شده حاصل از نورد پس از آنیل پرداخته است، همخوانی دارد. با توجه به این نمودار مي توان نتيجه گرفت كه با افزايش ناهمگني کرنش در سطح نمونه، ناهمگنی اندازه دانهها در ریزساختار نهایی نیز بیشتر خواهد شد. بعنوان مثال، در صورتی که فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار در مسیر A تا تعداد پاس.های بالاتری ادامه یابد، اختلاف کرنش بین سطح نمونه و پایین آن بیشتر شده و می توان انتظار داشت ناهمگنی ریزساختار نهایی نيز افزايش يابد.



شکل ۱۰ متوسط اندازه دانه ریزساختار نهایی پیشبینی شده در هر یک از مناطق دهگانه

مجدد یافته با سرعت کمی رشد میکنند (شکل ۹- چ) و ح)).











27μm MCS-



شکل ۹ تکامل ریزساختار پیش بینی شده طی تبلور مجدد در دمای ۲۲۳ کلوین پس از *فرایند فشردن در کانال های هم مقطع زاویه دار* با کانال ۹۰ درجه در دو پاس

همچنین مشاهده می شود که در برخی زمانها، نواحی کوچکی از بخش تبلور مجدد نیافته توسط دانههای تبلور مجدد احاطه شده و اصطلاحا به دام می افتند (شکل ۹ (ث)). این پدیده با یافتههای ایوانی، پیش بینی ریز ساختار نمونه فشرده شده در کانال های هم مقطع زاویه دار در زوایای کانال مختلف. در این بخش، ریز ساختار نهایی پیش بینی شده نمونه فشرده شده در کانال های هم مقطع زاویه دار در دو زاویه کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه در دو پاس با یکدیگر مقایسه خواهد شد. در شکل (۱۱)، تقریب های تکهای – خطی کرنش بر محدود می باشد، برای دو حالت ذکر شده نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود، کرنش مربوط شده است. همانطور که مشاهده می شود، کرنش مربوط به زاویه کانال ۱۲۰ درجه کمتر می باشد. بنابراین، انتظار باشد. زیرا برای این حالت انرژی ذخیره شده و در باشد. زیرا برای این حالت انرژی ذخیره شده و در نتیجه دانسیته جوانه زنی کمتر خواهد بود.

در شکل (۱۲)، ریزساختارهای پیش بینی شده نشان داده شده است. متوسط اندازه دانه برای زاویه

کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه به ترتیب برابر با ۲/۷۶ و ٤/۹۲ میکرومتر پیشبینی شده است.

شایان ذکر است که در حالت زاویه کانال ۱۲۰ درجه، به دلیل مقدار کرنش پایین، دانسیته جوانهها در دو منطقه آخر (دورترین مناطق از سطح)، صفر بوده که این عامل باعث میشود که ناهمگنی ریزساختار نهایی زیاد شود. در شکل (۱۳) متوسط اندازه دانه برای مناطق دهگانه نشان داده شده است. همانطور که از این نمودار نیز مشاهده میشود، در حالت زاویه کانال ۱۲۰ درجه، ناهمگنی بیشتری مشاهده میشود. انحراف معیار دادههای نرمال شده برای دو حالت زاویه کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه به ترتیب برابر با ۲۰/۰ و ۲/۰۰ بدست میآید که نشاندهنده مطلب فوق می باشد.



شکل ۱۱ تقریبهای تکه ای-خطی کرنش بر حسب فاصله از سطح، برای *فرایند فشردن در کانالهای* هم *مقطع زاویهدار* در دو زاویه کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه در دو پاس



شکل ۱۲ ریزساختار نهایی پیشبینی شده نمونه *فشره شده در کانالهای هممقطع زاویهدار* در زاویه کانال الف) ۹۰ و

ب) ۱۲۰ درجه در دو پاس



شکل ۱۳ متوسط اندازه دانه ریزساختار نهایی پیشبینی شده در هر یک از مناطق دهگانه برای زاویه کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه

این پژوهش در دو بخش کلی شبیهسازی اجزاء محدود فرایند فشردن در کانالهای هم مقطع زاویه دار با استفاده از نرمافزار آباکوس و پیاده سازی الگوریتم مونت کارلو در محیط برنامه نویسی متلب، به منظور پیش بینی ریز ساختار نهایی نمونه پس از آنیل، انجام شد. از منحنی کرنش بر حسب فاصله از سطح نمونه، بعنوان ورو دی مونت کارلو استفاده شد.

نتيجه گيري

نتایج بهدست آمده از شبیهسازی اجزاء محدود فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار بطور خلاصه بصورت زیر است:

- نتایج شبیه سازی ها نشان می دهد که، استفاده از تکنیک ALE به منظور شبیه سازی اجزاء محدود فرایند فشردن در کانال های هم مقطع زاویه دار، در قالب ۹۰ درجه (و یا کمتر)، در دمای محیط، در پاس های یک و بالاتر مورد نیاز است. در حالی که در دماهای یالاتر و پاسهای بیشتر، به دلیل کرنش های اعمالی کمتر و همچنین کم شدن اثر اصطکاک سطحی در دماهای بالاتر، استفاده از تکنیک ALE مورد نیاز نمی باشد.
- نتایج توزیع کرنش نشان میدهد که کرنش از بالا به پایین نمونه فشرده شده در کانالهای هممقطع زاویهدار کاهش مییابد که دلیل آن، اختلاف سرعت المانهای سطوح بالا و پایین نمونه میباشد. به این معنی که المانهای سطوح بالایی

باید با سرعت بیشتری نسبت به المانهای پایینی حرکت کنند تا هندسه تغییرشکل حفظ شود. همچنین، نتایج بهدست آمده از پیشبینی ریزساختار با استفاده از الگوریتم مونت کارلو بطور خلاصه بهصورت زیر است:

از کرنشهای بهدست آمده از شبیهسازی اجزاء محدود برای محاسبه توزیع انرژی ذخیره شده در شبکه اولیه ورودی به الگوریتم تبلورمجدد مونت کارلو استفاده شده و به این ترتیب کوپل شبیهسازی اجزاء محدود و مونت کارلو انجام شد.

با افزایش ناهمگنی کرنش در سطح نمونه، ناهمگنی اندازه دانهها در ریزساختار نهایی نیز بیشتر خواهد شد.

- با افزایش زاویه کانال قالب فرایند فشردن در کانالهای هممقطع زاویهدار، متوسط اندازه دانه نهایی پس از آنیل افزایش مییابد. متوسط اندازه دانه برای زاویه کانال ۹۰ و ۱۲۰ درجه به ترتیب برابر با ۲/۷٤ و ۲/۹۶ میکرومتر پیشبینی شد. همچنین در حالت زاویه کانال ۱۲۰ درجه، به دلیل مقدار کرنش پایین، دانسیته جوانهها در دو منطقه آخر (دورترین مناطق از سطح)، صفر بوده که این عامل باعث می شود که ناهمگنی ریزساختار نهایی زیاد شود.

مراجع

- Valiev R.Z., Langdon T.G., "Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement", *Progress in Materials Science*, Vol. 51, pp. 881-981, (2006).
- Humphreys F.J., Hatherly M., "Recrystallization and related annealing phenomena", *Elsevier Science*, Oxford, (1995).
- 3. Miodownik M.A., "A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and *recrystallisation* in aluminium alloys", *Journal of Light Metals*, Vol. 2, pp. 125–135, (2002).
- Srolovitz D.J., Anderson M.P., Grest G.S., Sahni P.S., "Grain growth in two dimensions", *Scripta Metallurgica*, Vol. 17, pp. 241-246, (1983).
- Fu H.H., *Benson* D.J., Meyers M.A., "Analytical and computational description of effect of grain size on yield stress of metals", *Acta Mater.*, Vol. 49, pp. 2567-2582, (2001).
- Sieradzki L., Madej L., "A perceptive comparison of the cellular automata and Monte Carlo techniques in application to static recrystallization modeling in polycrystalline materials", *Computational Materials Science*, Vol. 67, pp. 156-173, (2013).

۷. کاظمی نژاد م. ، "بررسی ناهمگنی تغییر فرم و ریزساختار سیمهای تخت شده حاصل از نورد و آنیل نهایی بوسیله روش اجزاء محدود و مدل مونت کارلو"، رساله دکتری، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شریف، (۱۳۸۵).
۸ حافظحقیقت س.م. ، کریمی طاهری ع.، "پیش بینی رشد دانه در آلومینیم خالص به روش مونت کارلو"، مجله علمی پژوهشی شریف، شماره بیست و هشتم، ص. ۷۷–۲۹، ( ۱۳۸۳).

- Humphreys F.J., "Modelling microstructural evolution during annealing", *Modelling Simul.* Mater. Sci. Eng., Vol. 8, pp. 893-910, (2000).
- Srolovitz D.J., Grest G.S., Anderson M.P., "Computer simulation of recrystallization-I. Homogeneous nucleation and growth", *Acta Metall.*, Vol. 34, No. 9, pp. 1833-1845, (1986).
- 11. Marthinsen K., Lohne O., Nes E., "The development of recrystallization microstructure studied experimentally and by computer simulation", *Acta Metall.*, Vol. 37, No. 1, pp. 135-145, (1989).
- Davies C.H.J., Hong L., "The cellular automaton simulation of static recrystallization in cold-rolled AA1050", *Scripta Materialia*, Vol. 40, No. 10, pp. 1145-1150, (1999).
- Anderson M.P., Srolovitz D.J., Grest G.S., Sahni P.S., "Computer simulation of grain growth-I. Kinetics", *Acta Metall.*, Vol. 32, No. 5, pp. 783-791, (1984).
- Morhac M., Morhacova E., "Monte Carlo simulation algorithms of grain growth in polycrystalline materials", *Cryst. Res. Technol.*, Vol. 35, No. 1, pp. 117–128, (2000).
- Srolovitz D.J., Grest G.S., Anderson M.P., Rollett A.D., "Computer simulation of recrystallization-II. Heterogeneous nucleation and growth", *Acta Metall.*, Vol. 36, No. 8, pp. 2115-2128, (1988).
- Song X., Rettenmayr M., "Modelling study on recrystallization, recovery and their temperature dependence in inhomogeneously deformed materials", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 332, pp. 153-160, (2002).
- 17. Rollett A.D., Srolovitz D.J., Doherty R.D., Anderson M.P., "Computer simulation of recrystallization in non-uniformly deformed metals", *Acta Metall.*, Vol. 31, No. 2, pp. 627-639, (1989).

- Song X., Rettenmayr M., Muller C., Exner H.E., "Modeling of recrystallization after inhomogeneous deformation", *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 32, pp. 2199- 2206, (2001).
- 19. Kazeminezhad M., "Simulation the ultra-fine microstructure evolution during annealing of metal processed by ECAP", *Computational Materials Science*, Vol. 43, pp. 309-312, (2008).
- Radhakrishnan B., Sarma G.B., Zacharia T., "Modeling the kinetics and microstructural evolution during static recrystallization-Monte Carlo simulation of recrystallization", *Acta Mater.*, Vol. 46, No. 12, pp. 4415-4433, (1998).
- Gil Sevillano J., Houtte P.V., Aernoudt E., "large strain work hardening and textures", *Progress in Materials Science*, Vol. 25, pp. 69-412, (1980).
- Kim W.J., Sa Y.K., Kim H.K., Yoon U.S., "Plastic forming of the equal-channel angular pressing processed 6061 aluminum alloy", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 487, pp. 360-368, (2008).
- 23. Li Y., Langdon T.G., "Creep behavior of an Al-6061 metal matrix composite reinforced with alumina particulates", *Acta Mater.*, Vol. 45, No. 11, pp. 4797-4806, (1997).
- Walasek T.A., "Experimental verification of Monte Carlo recrystallization model", Journal of Materials Processing Technology, Vol. 157-158, pp. 262-267, (2004).
- 25. Kazeminezhad M., Karimi Taheri A., Kiet Tieu A., "Utilization of the finite element and Monte Carlo model for simulating the recrystallization of inhomogeneous deformation of copper", *Computational Materials Science*, Vol. 38, pp. 765-773, (2007).
- 26. Iwahashi Y., Wang J., Horita Z., Nemoto M., Langdon T.G., "Principle of equal-channel angular pressing for the processing of ultra-fine grained materials", *Scripta Materialia*, pp. 143-146,(1996).
- 27. Deng G., Lu C., Su L., Tieu A.K., Li J., Liu M., Zhu H., Liu X., "Influence of outer corner angle (OCA) on the plastic deformation and texture evolution in equal channel angular pressing", *Computational Materials Science*, pp. 1-9, (2013).
- Eivani A.R., "Modeling of microstructural evolution during homogenization and simulation of transient state recrystallization leading to peripheral coarse grain structure in extruded Al-4.5Zn-1Mg alloy", PhD thesis, department of Material Science and Technology, the Delft University of Technology, (2010).