

# **Modelowanie ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej**

Rozprawa Doktorska  
**mgr inż. Karol Frydrych**

Promotor:  
dr hab. inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska



Instytut Podstawowych Problemów Techniki  
Polskiej Akademii Nauk  
02-106 Warszawa, ul. Adolfa Pawińskiego 5B

2017

# Podziękowania

Wyrażam głęboką wdzięczność promotorowi tej rozprawy, pani dr hab. inż. Katarzynie Kowalczyk-Gajewskiej, za ogromne wsparcie wiedzą, umiejętnościami i doświadczeniem oraz za olbrzymi nakład pracy włożony w pomoc przy przygotowaniu tej rozprawy.

Wyrażam również wdzięczność panu prof. dr hab. inż. Stanisławowi Stupkiewiczowi za udostępnienie ścieżek deformacji w procesie KOBO, pomoc w implementacji modelu plastyczności kryształów w środowisku AceGen/AceFEM i inspirujące pomysły oraz panu dr Jakubowi Lengiewiczowi za pomoc w przeprowadzeniu obliczeń w środowisku AceFEM.

Dziękuję panu dr inż. Michałowi Majowi, panu mgr inż. Tomaszowi Liburze oraz panu Leszkowi Urbańskiemu za udostępnienie wyników badań eksperymentalnych oraz wszelką pomoc w ich interpretacji.

Dziękuję również żonie, córce, rodzicom i innym niewymienionym tu osobiście osobom za okazane wsparcie i słowa zachęty w czasie prac nad przygotowaniem rozprawy. Wyrażam wdzięczność kolegom ze studium doktoranckiego i pracownikom IPPT za wszelką okazaną pomoc.

Dziękuję również za otrzymane wsparcie finansowe ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu 2013/09/B/ST8/03320.

Podziękowania byłyby niepełne, gdybym zapomniał podziękować Panu Bogu, Który postawił mnie w IPPT, dał mi siłę i wytrwałość do napisania pracy oraz utwierdzał w przekonaniu, że jestem na właściwym miejscu. Dziękuję Mu również za stworzenie niesamowicie złożonej natury świata, którą usiłujemy opisywać za pomocą uproszczonych modeli.

# Streszczenie

Przedmiotem niniejszej rozprawy doktorskiej jest modelowanie ewolucji mikrostruktury metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej. Podstawowym narzędziem modelowania była teoria plastyczności kryształów deformujących się przez poślizg i bliźniakowanie. Zastosowany model konstytutywny pojedynczego ziarna uwzględniał sprzężenia zachodzące między tymi dwoma mechanizmami deformacji plastycznej. W celu modelowania zachowania się agregatu polikrystalicznego stosowane były analityczne modele mikromechaniczne oparte na teorii pól średnich oraz model kontynualny wykorzystujący metodę elementów skończonych. W kontekście modeli analitycznych wykorzystano modele dwuskalowe z wewnątrz zgodnym schematem przejścia mikro-makro w różnych wariantach oraz oryginalny model trójskalowy. Model został sformułowany w celu opisu zjawiska rozdrobnienia ziaren.

W rozprawie zaprezentowano opis każdego z użytych sformułowań, przedstawiono dobór parametrów modeli oraz zaprezentowano wyniki modelowania odpowiedzi mechanicznej i rozwoju mikrostruktury podczas prób eksperymentalnych ściskania i rozciągania na zmiennych ścieżkach odkształcenia oraz procesów intensywnej deformacji plastycznej (KOBO i ECAP). Symulacje przeprowadzono dla materiałów o wysokiej wytrzymałości właściwej i sieci krystalograficznej heksagonalnej zwartej A3, jak również dla materiałów o sieci regularnej ściennie centrowanej A1, które uzyskują wysoką wytrzymałość właściwą na skutek umocnienia zachodzącego podczas intensywnej deformacji plastycznej.

Wyniki modelowania porównane zostały z wynikami doświadczeń uzyskanymi w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN, Instytucie Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, na Wydziale Inżynierii Materiałowej PW oraz zaczerpniętymi z literatury. W przypadkach, gdy za pomocą różnych modeli wykonywano symulacje takich samych procesów, przeprowadzono również porównania przewidywań modeli między sobą oraz określono, który model lepiej odwzorowuje zachowanie się materiału w eksperymencie.

# Abstract

The subject of the PhD thesis is modelling the microstructure evolution of metals and alloys of high specific strength subjected to severe plastic deformation processes. The basic tool to achieve this aim is the crystal plasticity theory accounting for slip and twinning. The applied constitutive model included the coupling between those two mechanisms of plastic deformation. In order to model the behaviour of polycrystalline aggregate, the analytical micromechanical models based on the mean-field theory and the full-field model set in the finite element method were used. As concerns the analytical models, the two-scale self-consistent models with various variants of micro-macro transition scheme, and the original three-scale model were employed.

The thesis contains descriptions of every formulation used, parameters identification and the results of modelling of mechanical response and microstructure development during experimental tests of compression and tension involving strain path change, and severe plastic deformation processes (KOB0 and ECAP). The simulations have been carried out for materials of high specific strength and hexagonal close packed lattice, as well as for face centered cubic materials, which achieve high specific strength as a result of hardening occurring during severe plastic deformation.

Whenever possible, the results of simulations have been compared with the results of experiments conducted in the Institute of Fundamental Technological Research of PAS, Institute of Metallurgy and Materials Science of PAS, Faculty of Materials Science and Engineering of WUT and available in literature. In the case when the plastic deformation process under consideration was simulated with use of different approaches it was discussed which of the proposed descriptions provides the best assessment of material behaviour with respect to the experimental data.

# Spis treści

|   |            |
|---|------------|
| <b>Podziękowania</b>  | <b>ii</b>  |
| <b>Streszczenie</b>   | <b>iii</b> |
| <b>Abstract</b>   | <b>iv</b>  |
| <b>1 Wstęp. Motywacja</b>   | <b>1</b>   |
| 1.1 Materiały o wysokiej wytrzymałości właściwej . . . . .                                    | 1          |
| 1.2 Procesy intensywnej deformacji plastycznej . . . . .                                      | 2          |
| 1.3 Deformacja plastyczna CP Ti i AZ31b . . . . .   | 3          |
| 1.4 Rozdrobnienie ziaren . . . . .  | 8          |
| 1.5 Modelowanie - stan wiedzy . . . . .   | 10         |
| 1.5.1 Modelowanie bliźniakowania . . . . .  | 11         |
| 1.5.2 Modelowanie rozdrobnienia ziaren . . . . .  | 12         |
| 1.6 Cel, zakres i teza pracy doktorskiej . . . . .  | 15         |
| 1.7 Notacja . . . . .   | 16         |
| 1.8 Wykaz skrótów . . . . .   | 16         |
| <b>2 Model pojedynczego kryształu</b>   | <b>18</b>  |
| 2.1 Kinematyka . . . . .  | 18         |
| 2.2 Równania konstytutywne . . . . .  | 21         |
| 2.3 Prawa umocnienia . . . . .  | 23         |
| <b>3 Dwuskalowy model mikromechaniczny polikryształu</b>                                      | <b>26</b>  |
| 3.1 Opis modelu dwuskalowego . . . . .  | 26         |
| 3.1.1 Sformułowanie modelu wewnętrznie zgodnego . . . . .                                     | 28         |
| 3.1.2 Warianty przejścia mikro-makro . . . . .  | 29         |
| 3.2 Dobór parametrów modelu . . . . .   | 30         |
| 3.2.1 Dobór parametrów modelu czystego tytanu deformowanego w procesach ECAP i KOBO . . . . . | 30         |
| 3.2.2 Dobór parametrów modelu stopu AZ31b . . . . .   | 33         |
| 3.3 Symulacje rozwoju tekstury . . . . .  | 49         |
| 3.3.1 Czysty tytan - ECAP . . . . .   | 49         |
| 3.3.2 Czysty tytan - KOBO . . . . .   | 57         |
| 3.3.3 Stop magnezu AZ31b – ECAP . . . . .   | 60         |
| 3.4 Podsumowanie . . . . .  | 65         |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| <b>4</b> | <b>Trójskalowy model mikromechaniczny polikryształu</b>   | <b>68</b>  |
| 4.1      | Sformułowanie modelu . . . . .  | 68         |
| 4.2      | Symulacje rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie ECAP dla polikryształów o sieci A1 . . . . .       | 70         |
| 4.2.1    | Model Taylora jako model przejścia między poziomem polikryształu i metaziarna . . . . .                         | 71         |
| 4.2.2    | Model VPSC jako model przejścia między poziomami polikryształu i metaziarna . . . . .                           | 74         |
| 4.2.3    | Wpływ aktywności systemów poślizgu na ewolucję kątów misorientacji . . . . .                                    | 75         |
| 4.2.4    | Porównanie z wynikami eksperymentalnymi dla czystego aluminium i stopu aluminium . . . . .                      | 80         |
| 4.3      | Symulacje rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie walcowania na zimno materiału o sieci A3 . . . . . | 80         |
| 4.3.1    | Dobór parametrów modelu . . . . .   | 83         |
| 4.3.2    | Symulacja rozwoju mikrostruktury czystego tytanu podczas walcowania na zimno . . . . .                          | 84         |
| 4.4      | Podsumowanie i wnioski . . . . .  | 88         |
| <b>5</b> | <b>Model kontynualny MES</b>  | <b>90</b>  |
| 5.1      | Implementacja . . . . .   | 90         |
| 5.1.1    | Misorientacje i nowe ziarna . . . . .   | 92         |
| 5.1.2    | Współczynniki Taylora . . . . .   | 92         |
| 5.2      | Modelowanie rozwoju mikrostruktury w procesie ECAP dla materiału o sieci A1 . . . . .                           | 94         |
| 5.2.1    | Tekstura . . . . .  | 95         |
| 5.2.2    | Nowe ziarna . . . . .   | 97         |
| 5.2.3    | Rozkłady kątów misorientacji . . . . .  | 97         |
| 5.2.4    | Sformułowanie zależne od skali czasu . . . . .  | 101        |
| 5.2.5    | Dyskusja . . . . .  | 104        |
| 5.3      | Symulacje prób eksperymentalnych dla stopu AZ31b . . . . .  | 110        |
| 5.3.1    | Symulacje dla próbek z walcowanej blachy . . . . .  | 113        |
| 5.3.2    | Symulacje dla próbek z wyciskanego pręta . . . . .  | 123        |
| 5.4      | Symulacja procesu ECAP dla stopu AZ31b . . . . .  | 126        |
| <b>6</b> | <b>Podsumowanie i wnioski</b>   | <b>130</b> |
|          | <b>Dodatek</b>  | <b>133</b> |
|          | <b>Literatura</b>   | <b>135</b> |

# Rozdział 1

## Wstęp. Motywacja

### 1.1 Materiały o wysokiej wytrzymałości właściwej

Wytrzymałość właściwa (ang. specific strength) jest to stosunek wytrzymałości do gęstości materiału. Wysoka wartość tego parametru jest więc ważna wszędzie tam, gdzie istotne jest ograniczenie masy konstrukcji przy jednoczesnym spełnieniu wymogów wytrzymałościowych. Przykładowym polem zastosowań materiałów o wysokiej wytrzymałości właściwej jest przemysł lotniczy i samochodowy, gdzie ograniczenie masy konstrukcji skutkuje oszczędnością paliwa, co jest korzystne nie tylko ze względów ekonomicznych ale także ma pozytywny wpływ na środowisko naturalne.

Materiały rozważane w rozprawie to czysty technicznie tytan (CP Ti - ang. commercially pure Ti) i stop magnezu AZ31b. Oba te materiały charakteryzują się wysoką wytrzymałością właściwą. Wykazują też jednak silną anizotropię odpowiedzi mechanicznej w zakresie plastycznym i są trudno formowalne, co ogranicza ich zastosowanie. Sieć krystalograficzna zarówno tytanu, jak i stopu magnezu AZ31B to sieć heksagonalna zwarta A3 (wg nazewnictwa angielskiego HCP - hexagonal close packed).

W latach pięćdziesiątych XX wieku zaczęto stosować tytan i jego stopy na elementy konstrukcyjne i poszycia kadłubów, układy hydrauliczne oraz elementy silników samolotów, rakiety, pociski i statki kosmiczne<sup>1</sup>. Powodem tych zastosowań, była opisana w poprzednich akapitach wysoka wytrzymałość właściwa tych materiałów. Tytan i jego stopy cechują się bardzo wysoką odpornością na korozję, ponieważ na powierzchni materiału powstaje cienka (ok. 4nm) warstwa tlenków (Brunette et al., 2012). W szczególności materiały te są wysoce odporne na działanie słonej wody, dlatego z czasem zaczęto je stosować do budowy łodzi podwodnych, śrub okrętowych, wałów i innych części wystawionych na działanie wody morskiej. Kolejnym polem wykorzystania materiałów opartych na tytanie są zastosowania biomedyczne. CP Ti ma zdecydowanie niższą wytrzymałość od popularnego stopu Ti-6Al-4V. Wzbudza on jednak duże zainteresowanie w zastosowaniach na protezy i implanty pozostające w organizmie człowieka, takie jak implanty dentystyczne, stawu kolanowego czy biodrowego. Czysty technicznie tytan ma w wypadku tych zastosowań przewagę nad stopem Ti-6Al-4V, ponieważ wykazuje bardzo dobrą biokompatybilność<sup>2</sup> (Valiev et al., 2008). W przypadku stopu Ti-6Al-4V, dodatki stopowe glin i wanad mogą okazać się toksyczne. Ponadto, stop ten jest bardziej podatny na korozję niż CP Ti. Zaletą czystego technicznie tytanu jest również jego lepsza

<sup>1</sup>Aerospace Specification Metals Inc. ASM. All about titanium aerospace metal. <http://www.aerospacemetals.com/all-about-titanium.html>. Dostęp: 9 maja 2017.

<sup>2</sup>Biokompatybilność: nietoksyczność oraz brak wywoływania stanów zapalnych i reakcji alergicznych por. (Williams, 2008).

obrabiwalność w porównaniu do stopów. Problemem pojawiającym się przy jego zastosowaniu jest jednak niewystarczająca wytrzymałość. Poprawę wytrzymałości można osiągnąć poprzez zastosowanie procesów intensywnej deformacji plastycznej – niektóre z nich były modelowane w niniejszej rozprawie.

Stopy magnezu znajdują zastosowania w przemyśle motoryzacyjnym jako elementy konstrukcji i wyposażenia samochodów takie jak: konstrukcja dachu i drzwi, łożo silnika, ramy siedzeń, obudowa skrzyni biegów, rama kierownicy, kołnierze uszczelniające, czy obudowa kolumny kierownicy<sup>3</sup>, (Mordike i Ebert, 2001). Stopy magnezu znajdują również zastosowanie w konstrukcji samolotów (Hadasik et al., 2009), m. in. jako elementy silnika i skrzyni biegów, poszycie kadłuba, drzwi, czy elementy siedzeń (Dziubińska et al., 2016). Stopy magnezu są również wykorzystywane jako obudowy przenośnych urządzeń elektronicznych.

## 1.2 Procesy intensywnej deformacji plastycznej

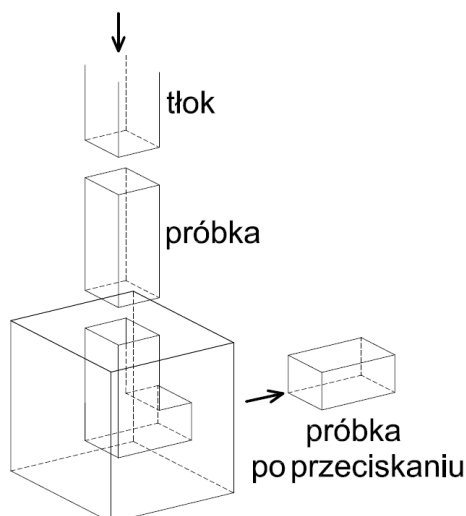
Właściwości materiałów mogą być poprawione przez zmianę ich mikrostruktury. Najbardziej efektywnym sposobem uzyskania korzystnej mikrostruktury jest zastosowanie procesów intensywnej deformacji plastycznej (SPD - ang. severe plastic deformation, ros. интенсивная пластическая деформация). W pracy (Valiev et al., 2006) proces intensywnej deformacji plastycznej zdefiniowano jako jakąkolwiek metodę formowania metali pod działaniem ciśnienia hydrostatycznego, która może być użyta w celu uzyskania w elemencie bardzo dużych odkształceń bez zmiany wymiarów elementu i w której następuje silne rozdrobnienie ziaren. W niniejszej rozprawie będzie jednak użyta definicja używana m.in. w pracy (Alexander, 2007), w której pomijane jest wymaganie zachowania wymiarów elementu poddanego procesowi.

Procesy SPD, które były poddawane analizie numerycznej w ramach przygotowania niniejszej rozprawy to procesy ECAP (Segal, 1979, 1995) i KOBO (Korbel i Bochniak, 2003). Oba procesy spełniają kryteria definicji z pracy (Alexander, 2007), ale definicję wg pracy (Valiev et al., 2006) spełnia tylko proces ECAP, gdyż wymiary elementu w procesie KOBO zmieniają się. Proces ECAP (ang. equal channel angular pressing, ros. равноканальное угловое прессование) (Rys. 1.1) polega na przeciskaniu materiału przez kanał kątowy. Wymiary przekroju kanału są stałe, a więc przekrój próbki w trakcie przeciskania nie zmienia się, co pozwala na wykonywanie procesu wielokrotnie. W przypadku wielokrotnego przeciskania można wyróżnić 4 ścieżki procesu w zależności od kąta obrotu wokół podłużnej osi próbki między kolejnymi przejściami przez kanał: A, Ba, Bc i C (Rys. 1.2). Deformacja w procesie ECAP może być modelowana jako proste ścinanie. Poniżej schematów ścieżek zamieszczono deformację kulistego elementu objętości na ścieżce deformacji. W tym wypadku zamiast obracać element objętości próbki wykonano obrót ścieżki deformacji tak, aby deformacja (przy założeniu prostego ścinania w pojedynczym przejściu) była taka, jak w rzeczywistej ścieżce. W ścieżce A próbka nie jest obracana wokół osi, natomiast w ścieżce C kąt obrotu po każdym przejściu wynosi  $180^\circ$ . W ścieżkach Ba i Bc próbka jest za każdym razem obracana o  $90^\circ$ , ale w ścieżce Ba obrót po każdym przejściu jest wykonywany w przeciwną stronę niż w przejściu poprzednim, natomiast w ścieżce Bc kierunek obrotu jest stały. W ścieżkach A i Ba każde przejście powoduje postępujące ścięcie materiału, natomiast w ścieżkach Bc i C po kilku przejściach element wraca do swojego pierwotnego kształtu. Wybór ścieżki ma istotny wpływ na mikrostrukturę i właściwości mechaniczne zdeformowanego materiału, (Langdon, 2007).

W procesie KOBO (Korbel i Bochniak, 2003) deformacja materiału jest znacznie bardziej skomplikowana. Proces ten polega na wyciskaniu materiału przy dodatkowych cyklicznych oscylacjach obrotowych matrycy, por. Rys. 1.3a. Deformacja materiału jest bardzo niejednorodna, ale wykazuje

<sup>3</sup>The University of British Columbia. Nserc magnesium network. <http://magnet.ubc.ca>. Dostęp: 9 maja 2017.





Rysunek 1.1: Schemat procesu ECAP (Langdon, 2007).

symetrię osiową. Petryk i Stupkiewicz (2014) ustalili ścieżki, po jakich porusza się punkt materialny w procesie korzystając z metody elementów skończonych w sformułowaniu Eulera. Ścieżki zależą od parametrów procesu (kąt obrotu, stopień przerobu, prędkość obrotu, prędkość wyciskania) oraz współrzędnej promieniowej danego punktu. Rys. 1.3b przedstawia tak ustalone ścieżki dla parametrów procesu  $\phi_0 = \pm 6^\circ$ ,  $d_0 : d = 35 : 8\text{mm}$ ,  $f = 5\text{Hz}$ ,  $V_0 = 0.5\text{mm/s}$ . Rezultatem niejednorodnej deformacji jest niejednorodność mikrostruktury i tekstury wzdłuż promienia uzyskanego w procesie pręta.

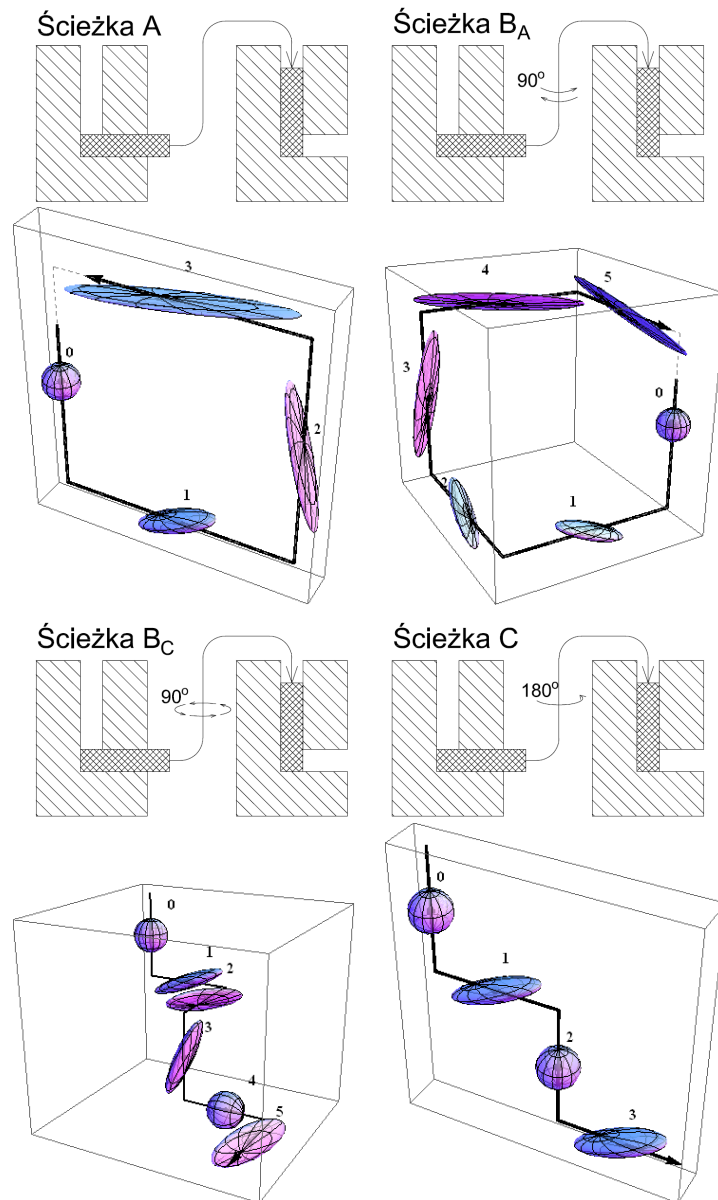
### 1.3 Deformacja plastyczna CP Ti i AZ31b

Jak już wspomniano, pojedyncze kryształy zarówno czystego technicznie tytanu, jak i stopu magnezu AZ31b mają strukturę heksagonalną zwartą A3 (Rys. 1.4). W temperaturze pokojowej ruch dyslokacji w przypadku stopu AZ31b zachodzi w sposób łatwy na płaszczyznach bazalnych, por. Rys. 1.5a (Wang i Huang, 2007). Poślizg niebazalny jest trudniejszy od bazalnego (Agnew i Duygulu, 2005), przy czym ruch dyslokacji po płaszczyznach pryzmatycznych (por. Rys. 1.5b) jest łatwiejszy niż po płaszczyznach piramidalnych  $\langle c+a \rangle$  (por. Rys. 1.5d i e) (Clausen et al., 2008). W przypadku czystego tytanu to poślizg po płaszczyznach pryzmatycznych jest najłatwiejszy, poślizg bazalny jest trudniejszy, ale również stosunkowo łatwy do uruchomienia, natomiast poślizg po płaszczyznach piramidalnych  $\langle c+a \rangle$  jest trudny do uruchomienia (Bozzolo et al., 2007).

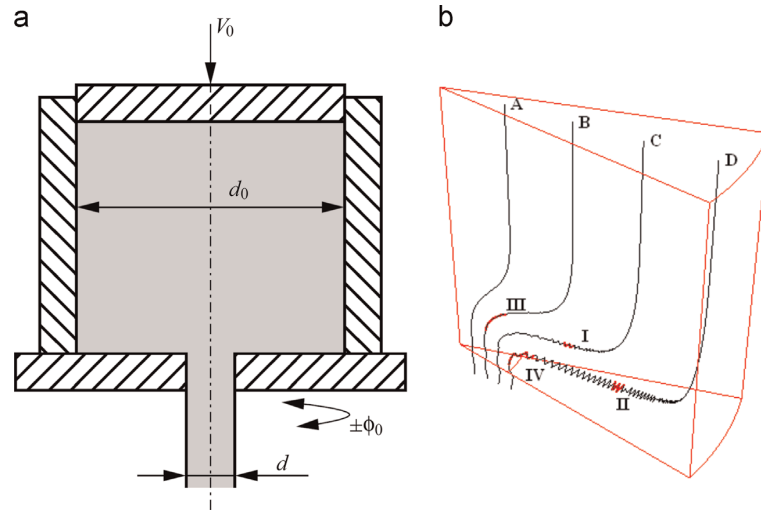
Poślizg po płaszczyźnie bazalnej, pryzmatycznej i piramidalnej  $\langle a \rangle$  (por. Rys. 1.5c) umożliwia deformację pojedynczych kryształów CP Ti i AZ31b w kierunku osi „a” pojedynczego kryształu. Deformacja przez ruch dyslokacji w kierunku osi „c” musi odbywać się na płaszczyznach piramidalnych  $\langle c+a \rangle$ , co wymaga dużych naprężeń, a więc skutkuje silnym umocnieniem i niską ciągliwością materiału.

Znacząca deformacja plastyczna kryształów o sieci A3 może się również odbywać przez bliźniakowanie, które jest nagłym ruchem atomów, na skutek którego powstaje struktura krystaliczna będąca lustrzanym odbiciem fazy macierzystej. W przypadku rozważanych w rozprawie materiałów literatura podaje cztery najczęściej występujące rodziny systemów bliźniakowania:<sup>4</sup>

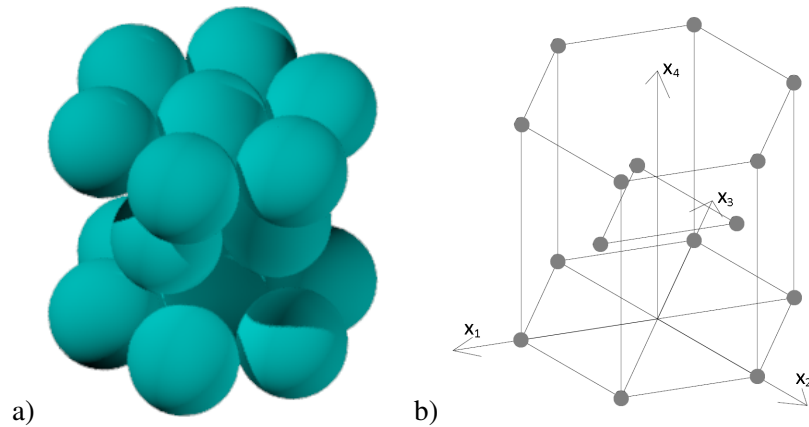
<sup>4</sup>Litery T i C odnoszą się do nazw angielskich odpowiednio tensile i compressive twinning. Tensile (compressive)



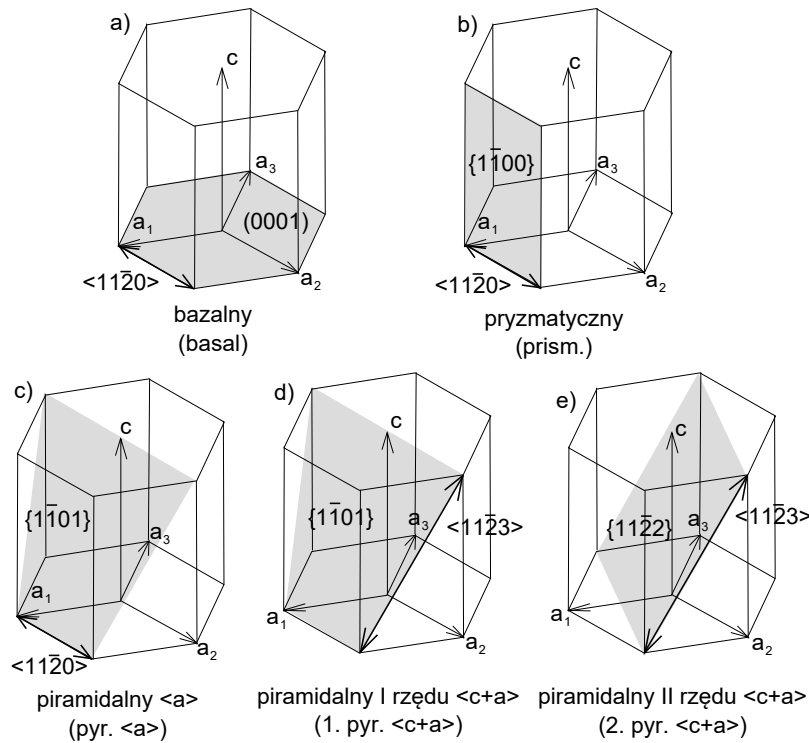
Rysunek 1.2: Ścieżki w procesie ECAP (Langdon, 2007) i odpowiadająca im deformacja kuli-stego elementu objętości przy założeniu zachodzenia prostego ścinania (Kowalczyk-Gajewska et al., 2014).



Rysunek 1.3: a) Schemat procesu KOBO. b) Trajektorie 4 punktów materialnych wyznaczone w symulacji MES dla modelu bez umocnienia i parametrów procesu  $\phi_0 = \pm 6^\circ$ ,  $d_0 : d = 35 : 8\text{mm}$ ,  $f = 5\text{Hz}$ ,  $V_0 = 0.5\text{mm/s}$  (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015).



Rysunek 1.4: Struktura heksagonalna zwarta A3 (ang. hexagonal close packed (HCP)) a) Wizualizacja ustawienia atomów przedstawionych jako sztywne kule. b) Widok komórki sieci krystalicznej wraz z zaznaczonymi osiami krystalograficznymi.



Rysunek 1.5: Płaszczyzny i kierunki poślizgu dla najczęściej występujących rodzin systemów poślizgu występujących w CP Ti i AZ31b.

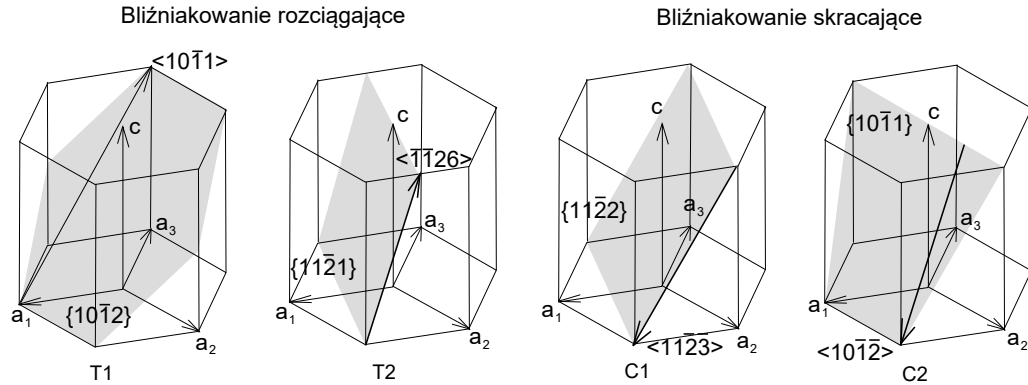
T1  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ , T2  $\{11\bar{2}1\} \langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle$ , C1  $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$  i C2  $\{10\bar{1}1\} \langle 10\bar{1}\bar{2} \rangle$ , por. (Christian i Mahajan, 1995; Li et al., 2013). Płaszczyzny i kierunki bliźniakowania dla czterech powyższych rodzin systemów przedstawia Rys. 1.6. Spośród powyżej wymienionych rodzin najbardziej powszechne jest bliźniakowanie T1, które może być uruchomione, gdy kryształ jest rozciągany w kierunku osi „c”. Aktywacja pozostałych systemów, o ile jest możliwa, wymaga zwykle większych naprężeń. Metale ulegające bliźniakowaniu na różnych rodzinach systemów są bardziej ciągliwe niż bliźniakujące tylko na rodzinie T1 (Yoo, 1981).

Trudność deformacji pojedynczego kryształu wpływa na trudności formowania materiałów polikrystalicznych, których dotyczy rozprawa. Należy w tym miejscu określić, jak w bieżącej pracy rozumiane jest pojęcie tekstury. Przez teksturę rozumiemy tu ukierunkowanie orientacji krystalograficznej ziaren polikryształu. Dlatego w przypadku, gdy ziarna są zorientowane w sposób losowy mówimy o braku tekstury, w przeciwieństwie do silnej tekstury, gdy można wyróżnić kierunki, w pobliżu których gęstość orientacji jest duża.

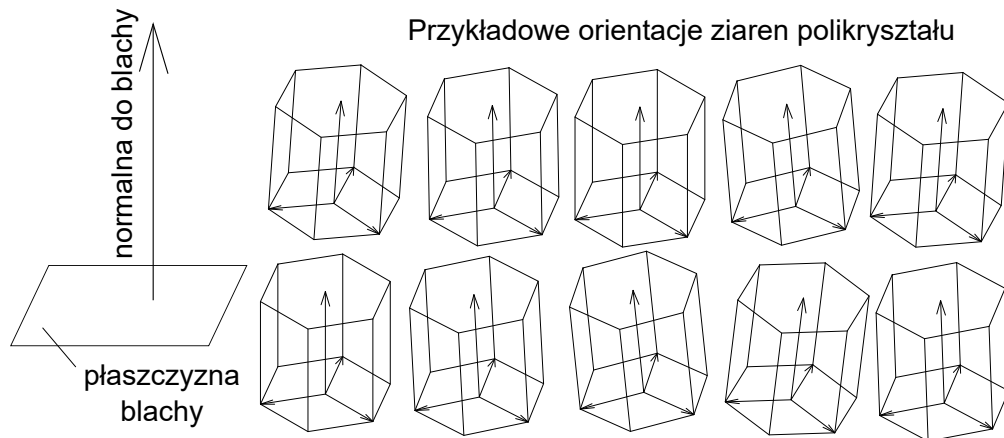
W materiale bez tekstury opisane powyżej trudności deformacji pojedynczego kryształu są trudniejsze do uchwycenia, ponieważ deformacja może zachodzić w ziarnach, które są korzystnie zorientowane dla łatwego poślizgu, np. po płaszczyznach bazalnych. W materiale z teksturą sytuacja staje się bardziej klarowna, bo anizotropia plastyczna pojedynczego kryształu skutkuje anizotropią polikryształu.

Przykładem materiału, w którym mamy do czynienia z anizotropowym polikryształem A3 jest walcowana blacha AZ31b o teksturze bazalnej, por. np. (Wu et al., 2010), gdzie większość kie-

twinning może zachodzić, gdy heksagonalna komórka elementarna jest rozciągana (skracana) w kierunku osi „c”. Alternatywnymi nazwami są extension i contraction twinning. Z uwagi na brak polskiego nazewnictwa w rozprawie będą używane nazwy bliźniakowanie rozciągające i skracające w odniesieniu do tensile i compressive twinning.



Rysunek 1.6: Płaszczyzny i kierunki bliźniakowania dla najczęściej występujących rodzin systemów bliźniakowania występujących w CP Ti i AZ31b.

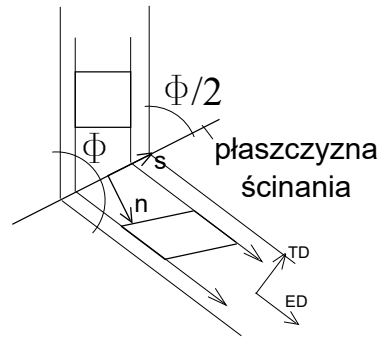


Rysunek 1.7: Schemat ustawienia większości orientacji ziaren polikryształu w stosunku do płaszczyzny blachy.

runków „c” komórki sieci A3 jest w przybliżeniu prostopadła do płaszczyzny blachy, por. Rys. 1.7. Rozciąganie blachy AZ31b o teksturze bazalnej w płaszczyźnie wymaga ruchu dyslokacji po niebazalnych płaszczyznach poślizgu, a więc skutkuje wyższą granicą plastyczności, niż ściskanie jej w płaszczyźnie, gdzie odkształcenie, przynajmniej w początkowym zakresie, może być akomodowane przez bliźniakowanie (w AZ31b w temperaturze pokojowej obserwuje się tylko bliźniakowanie rozciągające T1).

Odształcenie przez ruch dyslokacji prowadzi do ścięcia materiału. Z powodu przyłożonego obciążenia ścięciu temu towarzyszy również obrót materiału. Duże odkształcenia plastyczne prowadzą do rozwoju silnych tekstur. Jest to spowodowane tym, że orientacje sieci krystalicznych ziaren dążą do pewnych orientacji charakterystycznych dla danego procesu. Zjawisko rozwoju tekstury jest jednak złożone i przewidywanie rozwoju tekstury w danym procesie dla danego materiału wymaga zwykle użycia modeli numerycznych, w szczególności opartych na teorii plastyczności kryształów.

Szczególnie istotny wpływ na rozwój tekstury ma bliźniakowanie, które prowadzi do natychmiastowej reorientacji fragmentów sieci. Bliźniakowanie T1 powoduje odkształcenie 0,129 dla AZ31b i 0,175 dla CP Ti (Christian i Mahajan, 1995), przy jednoczesnym obrocie sieci o około  $90^\circ$ . Obrót sieci na skutek działania tylko poślizgu przy odkształceniach tego rzędu byłby znacznie mniejszy.



Rysunek 1.8: Schemat prostego ścinania w procesie ECAP (Segal, 1995).

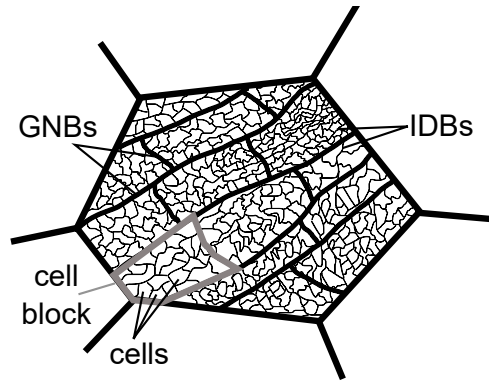
Jak już wspomniano, deformacja w procesie ECAP może być opisana jako proste ścinanie, a zatem i tekstura otrzymywana po pierwszym przejściu przez kanał jest teksturą prostego ścinania. Płaszczyzna ścinania jest obrócona względem kierunku wyciskania o kąt równy połowie kąta zagięcia kanału  $\Phi$  (Rys. 1.8). Z tego powodu figury biegunowe rzutowane na kierunek wyciskania (ED) i kierunek do niego prostopadły (TD) są obrócone względem figur rzutowanych na osie prostego ścinania  $n$  i  $s$ , por. (Beyerlein i Tóth, 2009). Wraz z kolejnymi przejściami na różnych ścieżkach złożoność procesu narasta, co utrudnia bezpośrednie porównania tekstury z teksturami prostego ścinania.

Proces KOBO jest z natury procesem bardziej złożonym niż proces ECAP i nie jest możliwe jego przybliżenie za pomocą stałego gradientu deformacji. Im dalej od osi matrycy, tym większe są jej oscylacje prowadzące do wielokrotnych ścięć materiału w przeciwnych kierunkach. W rezultacie tekstura materiału wzdłuż promienia nie jest jednorodna.

## 1.4 Rozdrobnienie ziaren

Podstawowym zjawiskiem, które prowadzi do poprawy właściwości materiałów w procesach intensywnej deformacji plastycznej jest rozdrobnienie ziaren. Wielu autorów starało się opisać mechanizmy powodujące zmniejszenie wymiarów ziaren w przypadku materiałów o sieci A1. Opis jakościowy można znaleźć np. w pracach: (Kuhlmann-Wilsdorf, 1999; Huang, 1998; Hughes i Hansen, 1997; Hansen et al., 2001; Valiev i Langdon, 2006; Langdon, 2007; Beyerlein i Tóth, 2009), gdzie dyskutowane jest powstawanie podstruktury dyslokacyjnej powodowanej deformacją. Na Rys. 1.9 pokazano schemat tej podstruktury. Autorzy wyróżniają dwa rodzaje granic: granice geometrycznie niezbędne (GNBs - ang. geometrically necessary boundaries) oraz przypadkowe granice dyslokacyjne (IDBs - ang. incidental dislocation boundaries). GNBs dzielą ziarna na bloki (ang. cell blocks), wewnątrz których deformacja plastyczna zachodzi na innych systemach poślizgu lub z innym poziomem odkształcenia. IDBs powstają przez przypadkowe blokowanie się (ang. trapping) ślizgających się dyslokacji (ang. glide dislocations). Akumulacji odkształcenia plastycznego towarzyszy spadek rozmiaru komórki do wartości nasycenia, jak również wzrost kątów misorientacji na granicach i wzrost udziału granic wysokiego kąta.

Zdecydowanie mniej poznane są mechanizmy rozdrobnienia ziaren w przypadku poddanych procesom SPD metali i stopów o sieci A3. Z jednej strony w materiałach tych deformacja odbywa się w inny sposób niż w materiałach o sieci A1 (zbyt mała liczba łatwych systemów poślizgu, bliźniakowanie). Z drugiej, mimo warty wspomnienia pomyślnych prób przeprowadzania procesów SPD na zimno (czysty tytan (Jäger et al., 2015), stop AZ31b (Gu et al., 2013)), zwykle wykony-



Rysunek 1.9: Schematyczny rysunek podstruktury dyslokacyjnej obserwowanej w metalach o sieci A1 poddanych małym i średnim odkształceniom plastycznym wg (Hughes i Hansen, 1997).

wane są one w podwyższonych temperaturach, które sprzyjają rekryształizacji dynamicznej (ang. DRX – dynamic recrystallization). W pracy (Beausir et al., 2009) przyjęto, że rekryształizacja dynamiczna w przypadku czystego magnezu zachodzi w temperaturze  $0,4T_M$ . Temperatura topnienia  $T_M$  wynosi dla magnezu 923K, zatem  $0,4T_M=369K$ , dlatego DRX może zachodzić w temperaturze  $96^\circ C$ . W pracy (Gu et al., 2013) obserwowano dynamiczną rekryształizację w stopie AZ31b poddanym procesowi ECAP w temperaturze pokojowej. Nie wywołuje to zaskoczenia, jeśli weźmie się pod uwagę fakt, że temperatura może wzrosnąć w procesie SPD nawet bez dodatkowego podgrzewania oraz, że możliwe są inne dodatkowe czynniki sprzyjające DRX. Figueiredo i Langdon (2010) zaproponowali model, według którego mechanizmem odpowiedzialnym za rozdrobnienie mikrostruktury stopu AZ31b w procesie ECAP jest nieciągła rekryształizacja dynamiczna (DDRX - ang. discontinuous dynamic recrystallization) - nowe ziarna powstają przy granicach ziaren początkowych lub przy granicach bliźniaczych. Dzieje się tak dlatego, że w miejscach tych występują wyższe naprężenia umożliwiające uruchomienie trudnych (nie-bazalnych) systemów poślizgu. Jeśli jednak początkowe ziarno jest dostatecznie małe, to poślizgi niebazalne mogą występować w całej jego objętości. Krytyczna wielkość ziarna, przy której to następuje może zależeć od danego stopu, temperatury przeciskania, czy panującego ciśnienia (ang. back-pressure). Jeśli początkowy rozmiar ziarna jest mniejszy od wartości krytycznej, możliwe jest uzyskanie równomiernego rozdrobnienia mikrostruktury już po pierwszym przejściu przez kanał. Jeśli jest większy, mikrostruktura uzyskana po jednym przejściu będzie zawierać zarówno małe, jak i duże ziarna. Model powstawania nowych ziaren w materiałach o sieci A3 na skutek rekryształizacji jest zgodny z wieloma obserwacjami doświadczalnymi dla stopu magnezu AZ31, por. m. in. (Su et al., 2006; Janeček et al., 2007; Lapovok et al., 2008; Ding et al., 2009).

$T_M$  czystego tytanu wynosi 1941K, a  $0,4T_M=776K$ , czyli  $503^\circ C$ . Temperatura, w jakiej można się zatem spodziewać DRX jest znacznie wyższa niż dla AZ31b. W związku z tym istnieją prace, w których autorzy opisują zjawisko rozdrobnienia ziaren przy użyciu analogicznych mechanizmów, jak w przypadku materiałów o sieci A1. Prace te dotyczą przede wszystkim procesów wykonywanych na zimno (poniżej  $0,4T_M$ ). Yang i współpracownicy (2010) analizowali mechanizm rozdrobnienia ziaren w pasmach ścinania powstających w walcowanym na zimno CP Ti. Autorzy określili, że za rozdrobnienie ziaren odpowiadają mechanizmy analogiczne do działających w materiałach o sieci A1. Ponadto, istotną rolę odgrywa bliźniakowanie. W pracy zauważono również, że mikrostruktura w pasmach ścinania jest podobna do obserwowanej w procesach SPD. Na tej podstawie wysnuto przypuszczenie, że opisane mechanizmy mogą prowadzić do rozdrobnienia ziaren również w procesach intensywnej deformacji plastycznej. Zeng, Jonsson i Roven (2009a) przeanalizowali

mechanizmy rozdrobnienia ziaren podczas ściskania na gorąco (zakres temperatur 673-973K) wyciskanej rury z CP Ti. Autorzy stwierdzili, że na rozdrobnienie mikrostruktury duży wpływ ma bliźniakowanie. W temperaturze 723K, a więc o 53 K niższej niż  $0,4T_M=776K$ , granice wysokiego kąta (HAGBs - ang. high angle grain boundaries) powstają zarówno poprzez mechanizm stopniowego wzrostu misorientacji na granicach niskiego kąta (LAGBs - ang. low angle grain boundaries), opisany dla materiałów o sieci A1, jak również jako deformowane granice bliźniacze.

## 1.5 Modelowanie - stan wiedzy

Modelowanie rozwoju mikrostruktury materiałów polikrystalicznych w procesach przeróbki plastycznej jest obiektem intensywnych badań realizowanych w wielu ośrodkach naukowych na świecie, m.in. Los Alamos National Laboratory (Tomé et al., 1991; Ardeljan et al., 2015; Beyerlein i Tóth, 2009), University of Metz (The Laboratory of Excellence 'DAMAS') (Beyerlein i Tóth, 2009; Tóth et al., 2010b), Monash University (Tóth et al., 2010b), Massachusetts Institute of Technology (Staroselsky i Anand, 1998, 2003), IMDEA Materials Institute (Fernández et al., 2011). Niniejsza rozprawa dotyczy modelowania przy użyciu teorii plastyczności kryształów (TPK). TPK zakłada deformację materiału przez poślizg lub bliźniakowanie. Modelowanie deformacji przez poślizg jest już dość dobrze ugruntowane w TPK, natomiast modelowanie bliźniakowania jest jeszcze wciąż w fazie intensywnego rozwoju. Podstawowymi trudnościami występującymi przy modelowaniu bliźniakowania jest poprawne odwzorowanie reorientacji części ziarna oraz jego wpływu na umocnienie materiału.

Bardzo ważnym zagadnieniem przy modelowaniu rozwoju mikrostruktury polikryształów w ramach TPK jest opis oddziaływania między poszczególnymi ziarnami polikryształu. Bardzo rozpowszechniony jest model Taylora (Taylor, 1938), w którym zakłada się, że każde ziarno deformuje się tak samo jak cały reprezentatywny element objętości. Nie daje on niestety odpowiednich przewidywań dla materiałów o sieci A3, gdzie z powodu małej liczby systemów łatwego poślizgu często występuje redystrybucja odkształceń między ziarnami. Inne podejście prezentuje model Sachsa (Sachs, 1928), w którym z kolei każde ziarno doświadcza takiego samego stanu naprężenia. Istotną wadą tego modelu jest nieciągłość pola przemieszczeń w materiale. Zalety obu modeli łączy podejście wewnętrznie zgodne (self-consistent), w którym każde ziarno traktowane jest jako elipsoidalna niejednorodność zanurzona w jednorodnym ośrodku reprezentującym polikryształ (Hill, 1965a; Berveiller i Zaoui, 1979; Lipiński et al., 1990; Lebensohn i Tomé, 1993). Wyżej wymienione modele można określić jako analityczne modele mikromechaniczne, często określane w literaturze anglojęzycznej jako modele średniego pola (ang. „mean-field”). Do ich wad należą m. in. założenie jednorodnej deformacji w ziarnie (co uniemożliwia modelowanie rozwoju rozdrobnienia ziaren przez stopniowe zmiany wzajemnych orientacji sieci krystalicznej poszczególnych części ziarna) oraz brak przewidywania rzeczywistych oddziaływań między najbliższymi sąsiadami.

Próba pokonania wad modeli opartych na teorii pól średnich jest implementacja modeli plastyczności kryształów do równań metody elementów skończonych (MES). Opis tego podejścia, nazywanego w skrócie CPFEM (ang. Crystal Plasticity Finite Element Method), z wieloma przykładami zastosowań i odniesieniami do literatury można znaleźć w książce autorstwa F. Rotersa i innych (2010). Przewidywanie rozwoju tekstury jest możliwe już przy zastosowaniu jednego elementu skończonego na ziarno (Mika i Dawson, 1998). Podział orientacji wewnątrz ziaren można modelować przy użyciu uproszczonych mikrostruktur, np. za pomocą dwuwymiarowego modelu z ziarnami w kształcie kwadratów podzielonych na elementy czworokątne (Wu et al., 2006). Niektóre zjawiska, jak np. zniszczenie rozpoczynające się przy granicach ziaren wymagają bardziej realistycznego modelowania ziaren (Diard et al., 2005) (za pomocą, np. teselacji Woronoja lub struk-



tur budowanych bezpośrednio na podstawie obserwacji mikrostrukturalnych, por. przegląd podejść używanych do generacji mikrostruktur w (Madej et al., 2011)), a w szczególności dobrego odwzorowania kształtu granic, co wymaga użycia nieregularnej siatki.

W przypadku symulacji dużych odkształceń plastycznych (np. w procesach SPD) za pomocą CPFEM w sformułowaniu Lagrange'a istotnym problemem okazują się dodatkowo bardzo duże deformacje siatki, które pogarszają przewidywania modelu. W przypadku silnego zdeformowania elementów można wykonać ponowną generację siatki (ang. remeshing) z przekazaniem zmiennych stanu. Takie podejście reprezentują prace (Kim et al., 2015; Prakash et al., 2015). Należy tu zaznaczyć, że bezpośrednia interpolacja takich zmiennych jak kąty Eulera ze starej do nowej siatki doprowadziłaby do powstania fałszywych orientacji, dlatego konieczne jest użycie bardziej zaawansowanych metod, jak np. algorytm SLERP (ang. Spherical Linear intERPolation) (Shoemake, 1985). Alternatywne podejście, które umożliwia pokonanie problemów dużych deformacji siatki to użycie metod bezsiatkowych. Metody te nie są tak szeroko stosowane jak metoda elementów skończonych, istnieją jednak próby ich implementacji w połączeniu z TPK w celu symulacji dużych odkształceń metali. Zahedi, Roy i Silberschmidt (Zahedi et al., 2015) wykorzystali implementację modelu materiałowego TPK kryształów o sieci A1 w połączeniu z metodą cząstek rozmytych (ang. smooth particle hydrodynamics) w programie ABAQUS. Inną metodą bezsiatkową jest metoda szybkich transformat Fouriera (ang. fast Fourier transforms - FFT), która jest stosowana do modelowania ewolucji tekstury przy założeniu sformułowania prędkościowego TPK i pominięciu odkształceń sprężystych (Lebensohn et al., 2008; Prakash i Lebensohn, 2009).

Opisany w rozprawie analityczny model dwuskalowy korzysta ze schematu wewnątrznie zgodnego. Model trójskalowy wykorzystuje model wewnątrznie zgodny i model Taylora. W rozdziale 5. opisano również symulacje rozwoju mikrostruktury przy użyciu modelu kontynualnego MES.

### 1.5.1 Modelowanie bliźniakowania

#### *Analityczne modele mikromechaniczne*

Modelowanie bliźniakowania w ramach TPK znajduje się w fazie intensywnego rozwoju. Pojawiło się już wiele podejść do modelowania zarówno umocnienia, jak i reorientacji sieci. Trzy podstawowe sformułowania dotyczące opisu reorientacji można znaleźć w pracach (Van Houtte, 1978), (Tomé et al., 1991) i (Kalidindi, 1998). W modelu Van Houtte'a (1978) reorientacja następuje, gdy udział objętościowy bliźniaków osiąga wartość krytyczną, wyznaczaną w sposób statystyczny. Wadą modelu jest wykorzystywanie przyrostu udziału objętościowego, a więc niebranie pod uwagę historii odkształcenia. W modelu, podobnie jak w jego późniejszej modyfikacji (Staroselsky i Anand, 1998, 2003) nie jest zachowana zgodność zakumulowanego udziału objętościowego bliźniaków z prawdopodobieństwem reorientacji. W pracy (Tomé et al., 1991) zaproponowano warunek reorientacji PTR (ang. Predominant Twin Reorientation), w którym warunek probabilistyczny zastąpiono deterministycznym. W modelu tym w celu ustalenia wartości krytycznej dla reorientacji wymagana jest jednak analiza całego agregatu polikrystalicznego. Wady obu schematów zostały pokonane w (Kowalczyk-Gajewska, 2011) poprzez propozycję nowego warunku reorientacji PTVC (ang. Probabilistic Twin Volume Consistent). Podstawową cechą alternatywnego modelu Kalidindi'ego (Kalidindi, 1998) jest przeprowadzenie wszystkich obliczeń w konfiguracji nieodkształconej – reorientacja sieci jest w nim zdefiniowana w odniesieniu do początkowej orientacji sieci kryształu, a w kolejnych krokach czasowych liczone są objętości zreorientowanych fragmentów.

### Modele MES

Powstało już wiele prac dokumentujących modelowanie bliźniakowania w ramach CPFEM. Staroselsky i Anand przeprowadzili symulacje z uwzględnieniem bliźniakowania w MES dla materiału polikrystalicznego o sieci A1 (Staroselsky i Anand, 1998) i A3 (Staroselsky i Anand, 2003). Użyty schemat reorientacji bazował na podejściu Van Houtte'a. Graff i współpracownicy (2007) przeprowadzili symulacje CPFEM dla materiału o sieci A3 (magnez), ale nie brali pod uwagę reorientacji sieci, która jest bardzo istotna w przewidywaniu odpowiedzi materiałów podatnych na bliźniakowanie. Prakash i Lebensohn (2009) wykonali symulacje plastyczności kryształów w MES dla stopu magnezu AZ31 (sieć A3) z reorientacją w punktach całkowania. Ich model był oparty na pomysłach Van Houtte'a (1978) i schemacie PTR (Tomé et al., 1991). Podejście Van Houtte'a zostało także wykorzystane w symulacjach CPFEM dla stopu magnezu przez Hama i Takuda (2011). Podobne podejście prezentuje praca Mayama et al. (2011) z modelowaniem procesu wyciskania stopu magnezu. Z kolei Zhang i Joshi (2012) w swoim modelu wykorzystali model Kalidingi'ego (1998). Przeprowadzili symulacje CPFEM dla czystego magnezu uwzględniając różne modele umocnienia dla bliźniakowania przy ściskaniu i rozciąganiu osi „c” komórki elementarnej. Z kolei w pracy (Cheng i Ghosh, 2015) przedstawiono zaawansowany model CPFEM uwzględniający zarodkowanie bliźniaków, ale nie uwzględniający ich wzrostu.

Oprócz reorientacji, istotną rolę w modelowaniu bliźniakowania odgrywa poprawne przewidywanie zjawiska umocnienia. Jednym z głównych mechanizmów uznawanych za powodujące umocnienie od bliźniakowania jest mechanizm Halla-Petcha (Hall, 1951; Petch, 1953), według którego płytki bliźniaków stanowią przeszkodę dla ruchu dyslokacji związanego z poślizgiem. Umocnienie było tłumaczone również innymi mechanizmami, np. mechanizmem Basińskiego (Basiński et al., 1997), który zakłada, że dyslokacje ruchome (ang. glissile) przed bliźniakowaniem są zamieniane na dyslokacje osiadłe (ang. sessile) wewnątrz bliźniaków, przez co bliźniaki stają się twardsze od otaczającej je matrycy. Przykładowym modelem umocnienia jest model sformułowany w (Kowalczyk-Gajewska, 2010) zastosowany w pracy (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015) do modelowania procesów SPD i wykorzystywany również w niniejszej rozprawie. Podobne modele były również proponowane w wymienionych wyżej pracach dotyczących uwzględnienia reorientacji w CPFEM. Poprawne modelowanie umocnienia ma istotny wpływ na przewidywanie odpowiedzi mechanicznej polikryształu, natomiast ma ono mniejszy wpływ na rozwój tekstury i rozdrobnienie ziaren. W pracach (Lévesque et al., 2006, 2010) zaprezentowano z kolei model umocnienia uwzględniający umocnienie od granic bliźniaczych. Początkowo wzrost objętości fazy bliźniaczej powoduje wzrost umocnienia, co uwzględnia wzrost gęstości granic bliźniaczych. W modelu założono jednak, że wraz z dalszym wzrostem objętości bliźniaków następuje łączenie się ich i zanik granic, a co za tym idzie umocnienie spada. Wydaje się, że taki model można zastosować jedynie w przypadku, gdy aktywny jest tylko jeden wariant danego systemu bliźniakowania.

### 1.5.2 Modelowanie rozdrobnienia ziaren

Istotnym zagadnieniem w przypadku modelowania rozwoju mikrostruktury metali i stopów poddanych procesom SPD jest modelowanie rozdrobnienia ziaren. Podstawowe mechanizmy prowadzące do powstania drobnoziarnistej mikrostruktury materiałów o sieci A1 zostały opisane w poprzedniej sekcji. Choć powstało już wiele prac dokumentujących modelowanie mikromechaniczne i w ramach MES rozdrobnienia ziaren w przypadku tych materiałów, żaden z modeli nie był jeszcze uznany za całkowicie poprawnie opisujący to zjawisko. Wśród istniejących modeli można wyróżnić cztery główne grupy.

### *Modele fenomenologiczne*

Pierwsza grupa to fenomenologiczne modele makroskopowe. Wg modelu Beygelzimera (Beygelzimer, 2005) akumulacja dyslokacji może prowadzić albo do powstania mikroporów, albo granic wysokiego kąta. W myśl tego modelu ciśnienie hydrostatyczne występujące w procesach SPD powoduje, że prowadzą one do rozdrobnienia ziaren, a nie zniszczenia materiału. Petryk i Stupkiewicz (Petryk i Stupkiewicz, 2007) badali ilościowo efekt intensywnej deformacji plastycznej na rozdrobnienie ziaren i umocnienie odkształceniowe. W modelu wymiar komórki dyslokacyjnej i bloku komórek jest wyrażony jako funkcja efektywnego odkształcenia plastycznego. Dodatkowo, standardowa definicja efektywnego odkształcenia plastycznego była zmodyfikowana w celu uwzględnienia zmian ścieżki odkształcenia.

### *Analityczne modele mikromechaniczne*

Drugą grupę stanowią analityczne modele mikromechaniczne wykorzystujące TPK, które wzbogacono o pewne dodatkowe cechy w celu uwzględnienia rozdrobnienia ziaren (Leffers, 2001a,b; Beyerlein et al., 2003; Nazarov et al., 2006; Enikeev et al., 2007; Tóth et al., 2010b; Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016). Leffers (Leffers, 2001a,b), korzystając z eksperymentalnie udokumentowanego podziału ziarna na bloki komórek zaproponował podział ziaren na dwie rodziny równoległych pasm. W modelu wymaganie pełnej zgodności odkształceń między pasmami wewnątrz ziaren jest złagodzone, natomiast ciągłość odkształceń między sąsiednimi ziarnami zapewnia wymuszenie takich samych odkształceń w każdym ziarnie. Wadą modelu jest wymaganie znajomości wstępnej orientacji pasm, która musi być wyznaczona w eksperymencie. Pomysł Leffersa posiada cechy wspólne z modelami LAMEL i ALAMEL (Van Houtte et al., 1999, 2005), które nie były zbudowane w celu analizy rozdrobnienia ziaren, lecz w celu polepszenia przewidywań tekstury w modelu Taylora przez złagodzenie silnych ograniczeń wymuszanych na agregacie przez założenie jednorodnego odkształcenia.

Uproszczony model rozdrobnienia ziaren został zaproponowany w pracy Beyerlein, Lebensohn i Tomé'go (2003). Kryterium podziału ziarna było oparte jedynie na kształcie ziarna. W modelu wykorzystywany jest lepko-plastyczny wewnętrznie zgodny (VPSC - ang. Visco-Plastic Self-Consistent) schemat przejścia mikro-makro (Lebensohn i Tomé, 1993; Tomé i Lebensohn, 2007), w którym każde ziarno jest reprezentowane przez deformującą się elipsoidę. Na podstawie stosunku długości osi elipsoidy określone jest, czy ziarno jest mocno wydłużone lub spłaszczone. W takich przypadkach ziarno jest dzielone odpowiednio na dwa lub cztery nowe ziarna.

W modelu Nazarova, Enikeeva i współpracowników (2006; 2007) założono, że podział ziarna następuje, gdy odkształca się ono wolniej niż otaczające je jednorodne medium reprezentujące polikryształ (ponownie wykorzystywany jest schemat VPSC). Z tego powodu podział ma miejsce dla ziaren najtrudniejszych do deformacji plastycznej w danym schemacie obciążenia. Po podziale liczba ziaren wzrasta o jeden. Model został oparty o obserwacje eksperymentalne zamieszczone w książce Duggana, Lim i Liu (1999), według których podzielone ziarna były bez wyjątku otoczone ziarnami o niższych współczynnikach Taylora.

W pracy Totha, Estrina i Lapovoka (2010b) zaprezentowano kolejny model oparty na mechanizmach fizycznych. Autorzy założyli, że obrót ziaren jest zatrzymywany przy granicach, co powoduje powstawanie zakrzywienia sieci. Zakrzywienie z kolei pociąga za sobą wzrost misorientacji wewnątrz ziarna i rozdrobnienie ziaren. W modelu każde ziarno było reprezentowane jako kostka Rubika podzielona na  $3 \times 3 \times 3$  podziarna. W zgodzie z podstawowym założeniem modelu inaczej obracają się podziarna w różny sposób zorientowane względem zewnętrznych ścian kostki. W przypadku gdy kąt misorientacji między podziarnami osiągał wartość krytyczną podziarno było traktowane jako nowe ziarno i ponownie dzielone na  $3 \times 3 \times 3$  podziarna. Używany był model Taylora - założenie takiej samej deformacji w każdym ziarnie i podziarnie. Modelowanie było ograni-

czone do dwóch przejść przez kanał kątowy z powodu ograniczeń numerycznych (liczba podziałów ziaren umożliwiająca uzyskanie rozmiarów ziaren występujących w rzeczywistej mikrostrukturze materiału poddanego procesowi ECAP) oraz z powodu użycia modelu Taylora, o którym autorzy napisali, że nie sprawdza się przy bardzo dużych deformacjach. W celu modelowania rozdrobnienia ziaren opracowano także model trójskalowy (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016), który zostanie przedstawiony w rozdziale czwartym.

### *Modele kontynuowane MES*

Trzecią grupę modeli stanowią modele CPFEM. W modelach tych można w sposób naturalny badać zjawisko rozdrobnienia mikrostruktury przyjmując wiele elementów na ziarno, lub nawet jeden element, ale z kilkoma punktami całkowania. Mika i Dawson (1998) porównywali przewidywania modelu CPFEM dla ziaren w kształcie prostopadłościanów i dwunastościanów. Autorzy stwierdzili, że tekstury zgodne z eksperymentem można uzyskać stosując obie reprezentacje mikrostruktury, nawet dla bardzo rzadkiej siatki, ale kształt kryształu i gęstość siatki mogą grać większą rolę w symulacjach rozwoju mikrostruktury wewnątrz ziaren. Barbe, Forest i Cailletaud (2001) zauważyli, że w symulacji CPFEM (przy założeniu małych odkształceń) można zaobserwować bardzo duże niejednorodności stanu naprężenia zarówno między ziarnami, jak i wewnątrz nich. Zaobserwowali także, że region granic ziaren deformuje się bardziej niż ich rdzenie ze względu na konieczność spełnienia warunku kompatybilności między sąsiednimi ziarnami.

Raabe, Zhao i Mao (2002) przy pomocy modelu CPFEM badali zależność rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren od wzajemnych oddziaływań ziaren. Rozdrobnienie ziaren było analizowane przez porównywanie orientacji między punktami całkowania w elementach sześciociennych. Każdy element reprezentował jedno ziarno. Autorzy stwierdzili, że interakcje sąsiednich ziaren mają znaczący wpływ na rozwój tekstury, ale na tendencję ziaren do ulegania rozdrobnieniu większy wpływ ma ich początkowa orientacja niż otaczające je sąsiednie ziarna. Z kolei Park i współautorzy (Park et al., 2002) badali efekt wpływu orientacji sąsiednich ziaren na tendencję do podziału orientacji w metalach o sieci BCC. Pokazali, że zmiana sąsiedztwa ma największy wpływ na orientacje niestabilne, podczas gdy jego wpływ na stabilne lub meta-stabilne orientacje jest bardzo mały.

Wu, Huang i Lloyd (2006) studiowali rozdrobnienie ziaren w materiale poddanym wielokrotnemu przeciskaniu przez kanał kątowy ECAP w ścieżce C za pomocą dwuwymiarowego modelu CPFEM. W ścieżce C ścinanie w parzystych przejściach jest zadawane w przeciwnym kierunku niż w przejściach nieparzystych. Dzięki temu w modelowaniu procesu przy pomocy MES można uniknąć dużego zniekształcenia elementów. Każde ziarno było reprezentowane przez kwadrat zawierający  $4 \times 4$  elementy czworokątne. Rozdrobnienie było brane pod uwagę przez analizowanie misorientacji między punktami całkowania. Knezevic i współautorzy (Knezevic et al., 2014) porównywali rozkłady misorientacji otrzymane w symulacjach walcowania przy użyciu dwu- i trójwymiarowego modelu CPFEM. Użyto realistycznego przybliżenia rzeczywistej struktury ziaren przy użyciu programu DREAM.3D. Stwierdzono, że efekty 3D mają wpływ na lokalne pola naprężeń i odkształceń w ziarnach, efekty sąsiedztwa, rozwój misorientacji wewnątrz ziaren i prędkości ewolucji tekstury. Ponadto różnice między modelami 2D i 3D rosną wraz z odkształceniem, co sugeruje, że w celu modelowania dużych odkształceń lepiej używać modeli trójwymiarowych.

### *Minimalizacja energii przyrostowej*

Czwartą grupę modeli stanowią prace korzystające z koncepcji minimalizacji energii przyrostowej. Podstawowe założenie metody jest następujące: jeśli energia wymagana do przeprowadzenia deformacji niejednorodnej jest mniejsza niż w przypadku deformacji jednorodnej, to nastąpi deformacja niejednorodna (por. praca (Mahesh i Tomé, 2004) wraz z zawartymi w niej odnośnikami). Przykładem jest podział ziarna na bloki komórek dyslokacyjnych, w których deformacja zachodzi

na różnych systemach poślizgu. W takim wypadku zwykle następuje redukcja liczby działających systemów poślizgu w porównaniu z ziarnem niepodzielonym. Podejście wykorzystujące teorię niestabilności materiału i minimalizację energii przyrostowej do opisu ewolucji mikrostruktury zostało przedstawione m. in. w pracach (Ortiz i Repetto, 1999; Petryk, 2003; Petryk i Kursa, 2013). Mimo swoich zalet i poczynionych ostatnio postępów (Petryk i Kursa, 2015) podejście to wciąż niestety nie jest wystarczająco efektywne obliczeniowo by pozwolić na przewidywanie rozdrobnienia ziaren i rozwoju tekstury w poddanych procesom SPD materiałach polikrystalicznych z dużą liczbą ziaren.

### *Metale o sieci A3*

Jak zauważono w poprzedniej sekcji, mechanizmy prowadzące do rozdrobnienia ziaren dla metali i stopów o sieci A3 poddanych procesom SPD są znacznie mniej poznane niż analogiczne mechanizmy dla metali o sieci A1. W związku z tym powstało o wiele mniej prac dokumentujących modelowanie powstawania drobnoziarnistej mikrostruktury w tych materiałach. Jak już wspomniano, za mechanizm prowadzący do rozdrobnienia mikrostruktury w procesach SPD (szczególnie prowadzonych w podwyższonych temperaturach) dla stopu magnezu AZ31b uważana jest nieciągła rekrytalizacja dynamiczna (Su et al., 2006; Figueiredo i Langdon, 2010). W pracy (Zhang et al., 2010) opisano symulację niekonwencjonalnego procesu łączącego wyciskanie i przeciskanie przez kanał kątowy dla stopu magnezu AZ31. Proces był wykonywany w temperaturze 350°C. Na podstawie wyników modelu sztywno-plastycznego MES obliczono wymiar ziarna po rekrytalizacji na podstawie fenomenologicznego równania, skalibrowanego wcześniej dla ściskania próbek. Autorzy stwierdzili, że uzyskali interesującą zgodność przewidywanych rozmiarów ziaren z eksperymentem, jednak nie przedstawili bezpośredniego porównania. Rozdrobnienie ziaren na skutek DDRX można modelować za pomocą metody automatów komórkowych. Gzyl i inni (Gzyl et al., 2013) modelowali rozdrobnienie ziaren stopu AZ31b w procesie ECAP i I-ECAP uzyskując dobrą zgodność przewidywań z eksperymentem. Autorzy wykorzystali wyniki analizy metodą elementów skończonych by wyznaczyć odkształcenia, prędkości odkształceń i temperaturę w punktach całkowania. Te wielkości były następnie użyte do symulacji rekrytalizacji dynamicznej metodą automatów komórkowych.

W przypadku czystego tytanu, rozdrobnienie ziaren w niektórych procesach, przeprowadzanych w tylko nieznacznie podwyższonych temperaturach, modelowano w oparciu o analogiczne mechanizmy rozdrobnienia jak w przypadku materiałów o sieci A1. W pracy (Ding i Shin, 2011) za proces SPD uznano obróbkę skrawaniem, ponieważ w wiórach powstaje drobnoziarnista lub nawet nanokrystaliczna mikrostruktura. Autorzy przewidzieli wymiary ziaren w wiórach czystego tytanu przy pomocy modelu ewolucji gęstości dyslokacji (Estrin et al., 1998; Tóth et al., 2002) w komórkach dyslokacyjnych i ścianach między nimi. W pracy (Ding et al., 2012) korzystając z podobnego modelu analizowano rozdrobnienie ziaren podczas walcowania na zimno czystego tytanu, gdzie temperatura maksymalna wyznaczona w symulacji wynosiła ok. 150°C. Za pomocą modelu udało się przewidzieć średnie rozmiary komórek dyslokacyjnych w dobrej zgodności z pomiarami eksperymentalnymi.

## **1.6 Cel, zakres i teza pracy doktorskiej**

Celem pracy jest opracowanie, weryfikacja i ewentualna modyfikacja wieloskalowych modeli mikromechanicznych w zakresie ich zdolności do przewidywania ewolucji mikrostruktury metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej poddanych procesom intensywnej deformacji plastycznej.

W rozprawie przedstawiono opis modeli i rezultaty symulacji prób eksperymentalnych wykonywanych na materiałach o wysokiej wytrzymałości właściwej. Rozdział drugi zawiera opis modelu

pojedynczego ziarna, a w szczególności równania opisujące kinematykę, zależności między deformacją, a odpowiedzią mechaniczną, prawa rządzące umocnieniem, a tym samym aktualnymi aktywnościami poszczególnych systemów poślizgu lub bliźniakowania. Rozdział trzeci dotyczy dwuskalowego analitycznego mikromechanicznego modelu plastyczności kryształów. W rozdziale zawarto opis przejścia mikro-makro, dobór parametrów modelu dla CP Ti i AZ31b w oparciu o wyniki eksperymentalne oraz symulacje rozwoju tekstury tych materiałów w procesach intensywnej deformacji plastycznej. W rozdziale czwartym przedstawiono sformułowanie trójskalowego modelu TPK, który również należy do grupy analitycznych modeli mikromechanicznych. W rozdziale zawarto również rezultaty symulacji rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren dla materiałów o sieci A1 i A3, deformowanych w procesie ECAP. Rozdział piąty przedstawia model kontynuacyjny polikryształu w sformułowaniu CPFEM. W rozdziale opisano używaną implementację, wyniki symulacji rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren otrzymane dla materiału o sieci A1 deformowanego w procesie ECAP oraz wyniki symulacji prób eksperymentalnych i procesu ECAP dla stopu AZ31b. W przypadku każdego z modeli opisanych w rozdziałach 3-5, wyniki symulacji zostały porównane z danymi eksperymentalnymi wykonanymi w instytucie autora i ośrodkach współpracujących lub dostępnymi w literaturze.

Przedstawione w rozprawie wyniki pozwoliły wykazać następującą tezę: *analityczne i kontynuacyjne modele mikromechaniczne, oparte na teorii plastyczności kryształów uwzględniających bliźniakowanie, są skutecznym narzędziem modelowania ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej.*

## 1.7 Notacja

- wektory oznaczane są pogrubioną małą literą alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbf{n}$ ,
- tensory drugiego rzędu oznaczane są pogrubioną dużą literą alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbf{L}$  lub pogrubioną małą literą alfabetu greckiego, np.  $\boldsymbol{\sigma}$ ,
- tensory czwartego rzędu oznaczane dużymi, pustymi literami alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbf{M}$ ,
- iloczyn tensorowy oznaczany symbolem  $\otimes$ , np.  $\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}$ ,
- pełne nasunięcie tensorów i iloczyn skalarny oznaczane symbolem  $\cdot$ , np.  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}$ ,
- proste nasunięcie tensorów – brak symbolu, np.  $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ .

## 1.8 Wykaz skrótów

W rozprawie wielokrotnie używane są skróty, zawsze wyjaśnione w miejscu pierwszego pojawienia się. Dla wygody czytelnika wykaz skrótów używanych w pracy przedstawiono poniżej:

- Aff – wariant afiniczny modelu VPSC (ang. affine)
- 2SCP – dwuskalowy model plastyczności kryształów (ang. 2-scale crystal plasticity model)
- 3SCP – trójskalowy model plastyczności kryształów (ang. 3-scale crystal plasticity model)
- CPFEM – implementacja modelu plastyczności kryształów w metodzie elementów skończonych (ang. crystal plasticity finite element method)
- CP Ti – tytan czysty technicznie (ang. commercially pure titanium)

- DIC – cyfrowa korelacja obrazu (ang. digital image correlation)
- DRX – rekrytalizacja dynamiczna (ang. dynamic recrystallization)
- DDRX – nieciągła rekrytalizacja dynamiczna (ang. discontinuous dynamic recrystallization)
- ED – kierunek wyciskania lub przeciskania (ang. extrusion direction)
- ES – element skończony
- FC – model Taylora (ang. full constraint)
- HAGBs – granice wysokiego kąta (ang. high angle grain boundaries)
- HMM – napężenie Hubera-Misesa-Hencky’ego
- IM – idealizacja mikrostruktury
- IP – punkt całkowania (ang. integration point)
- KIN – quasi kinematycznie jednorodne warunki brzegowe
- LAB – granice niskiego kąta (ang. low angle boundaries)
- MES – metoda elementów skończonych
- ND – kierunek normalny, np. do płaszczyzny blachy (ang. normal direction)
- ODF – funkcja rozkładu orientacji (ang. orientation distribution function)
- PER – mikro-periodyczne warunki brzegowe
- PK – plastyczność kryształów
- PRO – proste warunki brzegowe
- PTVC – procedura reorientacji (ang. probabilistic twin volume consistent)
- RD – kierunek walcowania (ang. rolling direction)
- Sc – wariant sieczny modelu VPSC (ang. secant)
- SPD – intensywna deformacja plastyczna (ang. severe plastic deformation)
- TD – kierunek poprzeczny walcowanej blachy (ang. transverse direction)
- Tg – wariant styczny modelu VPSC (ang. tangent)
- TPK – teoria plastyczności kryształów
- VPSC – lepko-plastyczny wewnętrznie zgodny (ang. visco-plastic self-consistent)
- WB – warunki brzegowe

## Rozdział 2

# Model pojedynczego kryształu

W bieżącym rozdziale zostaną opisane: kinematyka, równania konstytutywne i prawa umocnienia dla pojedynczego kryształu deformującego się przez poślizg i bliźniakowanie. Opisany tu model jest podstawą modelowania w modelach materiałów polikrystalicznych korzystających z teorii plastyczności kryształów (TPK) opisanych w niniejszej rozprawie, mianowicie dwu- i trójskalowym sformułowanych w ramach teorii pól średnich oraz modelu kontynualnym zaimplementowanym w metodzie elementów skończonych. Pełne sformułowanie jest używane w modelu kontynualnym, natomiast w modelach dwu- i trójskalowym pomijana jest sprężysta deformacja sieci.

### 2.1 Kinematyka

Używane jest sformułowanie TPK dla skończonych odkształceń, por. (Hill i Rice, 1972; Asaro, 1983; Anand i Kothari, 1996). Gradient deformacji  $\mathbf{F}$  jest rozkładany multiplikatywnie na część sprężystą  $\mathbf{F}^e$  i plastyczną  $\mathbf{F}^p$ , por. (Kröner, 1958; Lee, 1969; Duszek-Perzyna i Perzyna, 1998):

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p, \quad (2.1)$$

co skutkuje addytywnym rozkładem gradientu prędkości  $\mathbf{L}$ :

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p, \quad (2.2)$$

gdzie

$$\mathbf{L}^e = \dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{L}^p = \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad (2.3)$$

a kropka nad daną wielkością oznacza pochodną materialną. Gradient prędkości  $\mathbf{L}$  oraz jego część sprężystą  $\mathbf{L}^e$  i plastyczną  $\mathbf{L}^p$  można rozłożyć na część symetryczną i antysymetryczną:

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{\Omega}, \quad (2.4)$$

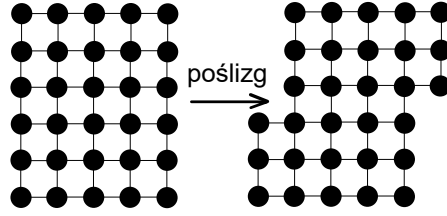
$$\mathbf{L}^e = \mathbf{D}^e + \mathbf{\Omega}^e, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p + \mathbf{\Omega}^p. \quad (2.6)$$

Część symetryczna gradientu deformacji,  $\mathbf{D}$ , nosi nazwę tensora prędkości deformacji ( $\mathbf{D}^e$  - sprężystych,  $\mathbf{D}^p$  - plastycznych), natomiast część antysymetryczna  $\mathbf{\Omega}$  nazywana jest tensorem spinu ( $\mathbf{\Omega}^e$  - sprężystego,  $\mathbf{\Omega}^p$  - plastycznego).

Zakłada się, że deformacja plastyczna przez poślizg nie zmienia ani geometrii, ani orientacji sieci kryształu (por. Rys. 2.1), a sieć deformuje się tylko sprężysto. Na mocy rozkładu polarnego





Rysunek 2.1: Ilustracja założenia o braku deformacji sieci krystalicznej na skutek działania poślizgu.

można zapisać część sprężystą gradientu deformacji jako złożenie tensora sztywnego obrotu  $\mathbf{R}^e$  i prawego tensora rozciągnięcia  $\mathbf{U}^e$ :

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e. \quad (2.7)$$

Deformacja kierunków sieciowych jest opisywana jako:

$$\mathbf{a} = \mathbf{F}^e \mathbf{a}_0, \quad (2.8)$$

gdzie  $\mathbf{a}$  jest dowolnym wektorem sieci kryształu w konfiguracji aktualnej, a  $\mathbf{a}^0$  jest tym wektorem w konfiguracji odniesienia. Odształcenia sprężyste w porównaniu z odształceniami plastycznymi są bardzo małe, szczególnie w procesach intensywnej deformacji plastycznej. Z tego powodu wpływ  $\mathbf{U}^e$  na deformację sieci był pominięty w analizowanych modelach mikromechanicznych (dwu- i trójskalowym), a zatem założono w nich, że sieć podlega wyłącznie obrotowi

$$\mathbf{a} = \mathbf{R}^e \mathbf{a}_0. \quad (2.9)$$

W używanym sformułowaniu, deformacja plastyczna zachodzi przez poślizg lub bliźniakowanie. Poślizg, czyli ruch dyslokacji po płaszczyznach poślizgu powoduje proste ścinanie sieci kryształu, ale bez zmiany jej geometrii. Zbiór systemów poślizgu  $\{\mathbf{n}^k, \mathbf{m}^k\}$ ,  $k = 1, \dots, M$  zawiera wektory normalne do płaszczyzn poślizgu  $\mathbf{n}^k$  i wektory kierunków poślizgu  $\mathbf{m}^k$ . Rys. 2.2 przedstawia wektory  $\mathbf{m}$  i  $\mathbf{n}$  dla bazalnego systemu poślizgu w kryształach o sieci A3. Tensor Schmidta jest definiowany jako diada:  $\mathbf{m}^k \otimes \mathbf{n}^k$ . Można go rozłożyć na część symetryczną  $\mathbf{P}^k$  i antysymetryczną  $\mathbf{W}^k$ . Reorientację sieciowych wektorów kierunków poślizgu  $\mathbf{m}^k$  opisuje równanie analogiczne do równania 2.8:

$$\mathbf{m} = \mathbf{F}^e \mathbf{m}_0. \quad (2.10)$$

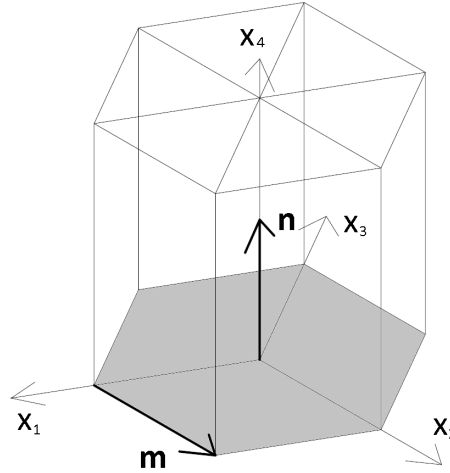
Reorientację wektorów normalnych do płaszczyzn poślizgu opisuje inne równanie, ponieważ w tym wypadku to dana płaszczyzna ulega deformacji, a wektor musi pozostać do niej normalny:

$$\mathbf{n} = (\mathbf{F}^e)^{-T} \mathbf{n}_0. \quad (2.11)$$

Pominięcie odształceń sprężystych ( $\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e$ ) stosowane w modelach mikromechanicznych skutkuje następującym równaniem ewolucji kierunków sieci:

$$\dot{\mathbf{a}} = \boldsymbol{\Omega}^e \mathbf{a} = \dot{\mathbf{R}}^e (\mathbf{R}^e)^T \mathbf{a}. \quad (2.12)$$

Bliźniakowanie, podobnie jak poślizg, zachodzi na skutek prostego ścinania. Różni się jednak od poślizgu tym, że zachodzi tylko w jednym kierunku, deformuje jedynie część ziarna, a kąt odształcenia postaciowego części ziarna podlegającej ścinaniu wynosi  $\gamma^{TW}$ . Wartość  $\gamma^{TW}$  jest ści-



Rysunek 2.2: Jeden z bazalnych systemów poślizgu w kryształach o sieci A3.

śle określona dla danego systemu bliźniakowania. Ponadto, zbliźniona część ma inną orientację niż orientacja macierzystego ziarna. Z tego powodu na skutek bliźniakowania wewnątrz ziarna powstaje podziarno, nazywane również bliźniakiem. Orientacja fazy bliźniaczej  $\mathbf{a}^{TW}$  jest określona jako (Van Houtte, 1978):

$$\mathbf{a}^{TW} = \mathbf{R}^{TW} \mathbf{a}^M = (2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{I})\mathbf{a}^M, \quad (2.13)$$

gdzie  $\mathbf{a}^M$  jest orientacją macierzystego ziarna, a  $\mathbf{n}$  jest jednostkowym wektorem normalnym do płaszczyzny bliźniakowania. Tensor  $\mathbf{R}^{TW}$  opisuje obrót wokół  $\mathbf{n}$  o kąt  $\pi$ .

Bliźniakowanie jest traktowane jako jednokierunkowy system poślizgu, por. (Chin et al., 1969; Kalidindi, 1998; Staroselsky i Anand, 1998). Prędkość pseudo-poślizgu  $\dot{\gamma}_{(t)}^l$  jest związana z prędkością przyrostu udziału objętościowego  $f^l$  bliźniaka powstającego na skutek działania systemu bliźniakowania  $l$  w ziarnie następującą zależnością:

$$\dot{\gamma}_{(t)}^l = \gamma^{TW} f^l. \quad (2.14)$$

Oznaczając prędkość poślizgu jako  $\dot{\gamma}_{(s)}^k$ , można przedstawić część plastyczną gradientu prędkości jako sumę ścinania na systemach poślizgu i bliźniakowania:

$$\mathbf{L}^p = \sum_{k=1}^{2M} \dot{\gamma}_{(s)}^k \mathbf{m}^k \otimes \mathbf{n}^k + \sum_{l=1}^N \dot{\gamma}_{(t)}^l \mathbf{m}^l \otimes \mathbf{n}^l = \sum_{r=1}^{2M+N} \dot{\gamma}^r \mathbf{m}^r \otimes \mathbf{n}^r. \quad (2.15)$$

W powyższym równaniu w celu połączenia części pochodzących od poślizgu i bliźniakowania, rozróżniany jest poślizg w kierunku  $\mathbf{m}$  i  $-\mathbf{m}$ .  $\dot{\gamma}^r$  oznacza prędkość ścinania na systemie  $r$ . Na mocy 2.10 i 2.11 można zauważyć, że

$$\dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{r=1}^{2M+N} \dot{\gamma}^r \mathbf{m}_0^r \otimes \mathbf{n}_0^r = \hat{\mathbf{L}}^p, \quad (2.16)$$

gdzie  $\mathbf{m}_0^r$  i  $\mathbf{n}_0^r$  są określone na konfiguracji odniesienia i konfiguracji pośredniej (ponieważ deformacja plastyczna nie zmienia kierunków sieci), a  $\hat{\mathbf{L}}^p$  to część plastyczna gradientu prędkości w konfiguracji odniesienia. Część symetryczna i antysymetryczna plastycznego gradientu prędkości jest

wyznaczana korzystając z części symetrycznej i antysymetrycznej tensora Schmid'a  $\mathbf{m}^r \otimes \mathbf{n}^r$ :

$$\mathbf{D}^p = \sum_{r=1}^{2M+N} \dot{\gamma}^r \mathbf{P}^r, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{\Omega}^p = \sum_{r=1}^{2M+N} \dot{\gamma}^r \mathbf{W}^r. \quad (2.18)$$

Pojawianie się nowych orientacji na skutek bliźniakowania ma istotny wpływ zarówno na rozwój tekstury polikryształu, jak i na zjawisko umocnienia. Reorientację sieci w modelu pojedynczego kryształu zapewnia procedura reorientacji PTVC (ang. probabilistic twin volume consistent) (Kowalczyk-Gajewska, 2010, 2011). W procedurze brana jest pod uwagę historia procesu deformacji. Zapewniona jest zgodność udziału objętościowego zreorientowanych ziaren i udziału objętościowego bliźniaków wynikającego z aktywności systemów bliźniakowania. Po spełnieniu warunku reorientacji sieć w całej objętości ziarna ulega reorientacji – model nie uwzględnia więc tworzenia rzeczywistych struktur bliźniaczych. Więcej szczegółów można znaleźć w pracach (Kowalczyk-Gajewska, 2010, 2011).

## 2.2 Równania konstytutywne

W modelowaniu używane były: sformułowania przemieszczeniowe niezależne i zależne od skali czasu oraz sformułowanie prędkościowe zależne od skali czasu. Pierwsze dwa warianty modelu były zastosowane w modelu kontynualnym elementu objętości polikryształu, natomiast ostatni w modelach mikromechanicznych (dwu- i trójskalowym).

W sformułowaniu przemieszczeniowym miary naprężenia i odkształcenia wiąże prawo hipersprężyste:

$$\mathbf{M}_e = 2\mathbf{C}_e \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}_e}, \quad (2.19)$$

gdzie  $\mathbf{M}_e$  jest naprężeniem Mandela:

$$\mathbf{M}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{S} \mathbf{F}_e^T = \mathbf{F}_e^T \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}_e^{-T}, \quad (2.20)$$

zaś  $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$  jest tensorem naprężenia Kirchhoffa uzyskanym przez pomnożenie tensora naprężenia Cauchy'ego  $\boldsymbol{\sigma}$  przez wyznacznik tensora gradientu deformacji  $J = \det \mathbf{F}$ . Symbol  $\mathbf{S}$  oznacza pierwszy tensor Pioli-Kirchhoffa  $\mathbf{S} = \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}$ , gdzie  $(\cdot)^{-T}$  oznacza operację odwrócenia i transpozycji tensora.  $\mathbf{C}_e = \mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e$  w równaniu 2.19 jest prawym tensorem Cauchy-Greena, a

$$\Psi = \frac{1}{2} \mathbf{E}_e \cdot \mathbb{L}^e \cdot \mathbf{E}_e \quad (2.21)$$

to gęstość energii swobodnej na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia.  $\mathbb{L}^e$  jest anizotropowym tensorem sztywności pojedynczego kryształu, a  $\mathbf{E}_e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_e - \mathbf{1})$  jest lagranżowskim tensorem odkształceń sprężystych.

W wariacie sformułowania przemieszczeniowego **zależnym od skali czasu** prędkości ścinania  $\dot{\gamma}^r$  są związane z efektywnym naprężeniem stycznym  $\tau^r$  na danym systemie  $r$  za pomocą następującego prawa potęgowego (Hutchinson, 1976; Asaro i Needleman, 1985):

$$\dot{\gamma}^r = v_0 \text{sign}(\tau^r) \left| \frac{\tau^r}{\tau_c^r} \right|^{\bar{n}}, \quad (2.22)$$

gdzie  $v_0$  jest parametrem materiałowym i określa wartość referencyjną prędkości ścinania, a  $\tau_c^r$  jest krytycznym efektywnym naprężeniem stycznym, którego wartość ewoluuje zgodnie z prawami umocnienia opisanymi w następnej sekcji tego rozdziału. Efektywne naprężenie styczne  $\tau^r$  jest rzutem naprężenia Mandela  $\mathbf{M}_e$  na kierunek i płaszczyznę poślizgu w konfiguracji odniesienia, co na mocy 2.10 i 2.11 jest równoznaczne z rzutem tensora naprężenia Kirchhoffa  $\boldsymbol{\tau}$  na kierunek i płaszczyznę poślizgu w konfiguracji aktualnej:

$$\tau^r = \langle \mathbf{m}_0^r \mathbf{M}_e \mathbf{n}_0^r \rangle = \langle \mathbf{m}^r \boldsymbol{\tau}_e \mathbf{n}^r \rangle, \quad \text{gdzie:} \quad \langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{jeżeli } x > 0, \\ 0 & \text{jeżeli } x \leq 0. \end{cases} \quad (2.23)$$

Powyższa definicja  $\tau^r$  pozwala uwzględnić jednokierunkowość bliźniakowania.

W wariacie sformułowania przemieszczeniowego **niezależnym od skali czasu** prędkości ścinania  $\dot{\gamma}^r$  są związane z naprężeniami przez stowarzyszone prawo płynięcia (Gambin, 1991, 1992):

$$\hat{\mathbf{L}}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{M}_e} \rightarrow \dot{\gamma}^r = \dot{\lambda} \frac{1}{\tau_c^r} \left( \frac{\tau^r}{\tau_c^r} \right)^{2n-1}, \quad (2.24)$$

gdzie  $F$  jest powierzchnią plastyczności opisaną równaniem (Kowalczyk i Gambin, 2004):

$$F(\boldsymbol{\sigma}) = \left( \sum_r \left( \frac{\tau^r}{\tau_c^r} \right)^{2n} \right)^{1/(2n)} - 1, \quad (2.25)$$

a  $\dot{\lambda}$  jest mnożnikiem plastycznym uzyskiwanym z warunków Kuhna-Tuckera:

$$\dot{\lambda} \geq 0 \wedge F \leq 0 \wedge \dot{\lambda} F = 0. \quad (2.26)$$

W sformułowaniu prędkościowym używanym w dwu- i trójskalowym modelu mikromechanicznym przyjmuje się, że odkształcenia sprężyste sieci są pomijalnie małe. W związku z tym zakłada się, że deformacja zachodzi przez ścinanie i jest niezależna od składowej hydrostatycznej stanu naprężenia oraz nie występują zmiany objętości. Dlatego  $J = \frac{dV}{dV_0} = 1$ , a więc naprężenie Kirchhoffa  $\boldsymbol{\tau}$  jest równe naprężeniu Cauchy'ego  $\boldsymbol{\sigma}$  oraz używa się dewiatora naprężenia  $\mathbf{s}$ :

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I}. \quad (2.27)$$

Ponieważ  $\mathbf{s}$  jest tensorem symetrycznym wzór 2.23 redukuje się do postaci:

$$\tau^r = \langle \mathbf{P}^r \cdot \mathbf{s} \rangle, \quad (2.28)$$

gdzie „ $\cdot$ ” oznacza pełne nasunięcie tensorów. Równanie 2.17 po podstawieniu pod  $\dot{\gamma}^r$  prawa potęgowego 2.22 i wzoru 2.23 można wyrazić w postaci:

$$\mathbf{D}^p = v_0 \sum_{r=1}^{2M+N} \text{sign}(\tau^r) \left| \frac{\mathbf{P}^r \cdot \mathbf{s}}{\tau_c^r} \right|^{\bar{n}} \mathbf{P}^r. \quad (2.29)$$

Warianty linearyzacji powyższego równania wykorzystywane w modelach dwu- i trójskalowym zostaną opisane w rozdziale 3.

## 2.3 Prawa umocnienia

Poruszające się dyslokacje napotykają na swojej drodze różnego rodzaju przeszkody, którymi są inne dyslokacje, atomy domieszek, cząstki obcych faz i granice ziarn (Przybyłowicz, 1999). Skutkiem zahamowania ruchu dyslokacji jest umocnienie materiału (wzrost wytrzymałości i twardości oraz spadek ciągliwości). W miarę postępującej deformacji plastycznej zwiększa się liczba przeszkód wskutek wzrostu liczby dyslokacji poruszających się i utwierdzonych. W pewnym momencie jednak gęstość dyslokacji w materiale osiąga nasycenie, co powoduje zanik dalszego umocnienia. Bliźniakowanie również prowadzi do umocnienia materiału. W literaturze opisano wiele mechanizmów prowadzących do umocnienia materiału na skutek bliźniakowania (Salem et al., 2006; Ahn et al., 2015), m.in. umocnienie teksturowe, przez mechanizm Halla-Petcha (Hall, 1951; Petch, 1953) oraz mechanizm Basińskiego (Basiński et al., 1997). Umocnienie może być zjawiskiem korzystnym lub niekorzystnym, w zależności od tego, czy wymaga się od danego elementu konstrukcyjnego spełnienia wymogów wytrzymałościowych, czy możliwości jego łatwego kształtowania w procesach przeróbki plastycznej. W obu przypadkach ważne jest poznanie i właściwe modelowanie zjawiska umocnienia. Dzięki temu możliwe jest zarówno przewidywanie zachowania się elementów konstrukcyjnych, jak i właściwe projektowanie procesów przeróbki plastycznej.

W sformułowaniu teorii plastyczności kryształów używanym w modelach dwu- i trójskalowym umocnienie materiału jest uzyskiwane przez wzrost wartości krytycznych efektywnych naprężeń stycznych (CRSS – ang. critical resolved shear stress) na systemach poślizgu i bliźniakowania:

$$\begin{aligned}\dot{\tau}_c^r &= H_{(ss)}^r \sum_{q=1}^M h_{rq}^{(ss)} \dot{\gamma}^q + H_{(st)}^r \sum_{q=2M+1}^{2M+N} h_{rq}^{(st)} \dot{\gamma}^q, \\ \dot{\tau}_c^{r+M} &= \dot{\tau}_c^r \quad \text{gdzie } r \leq M,\end{aligned}\quad (2.30)$$

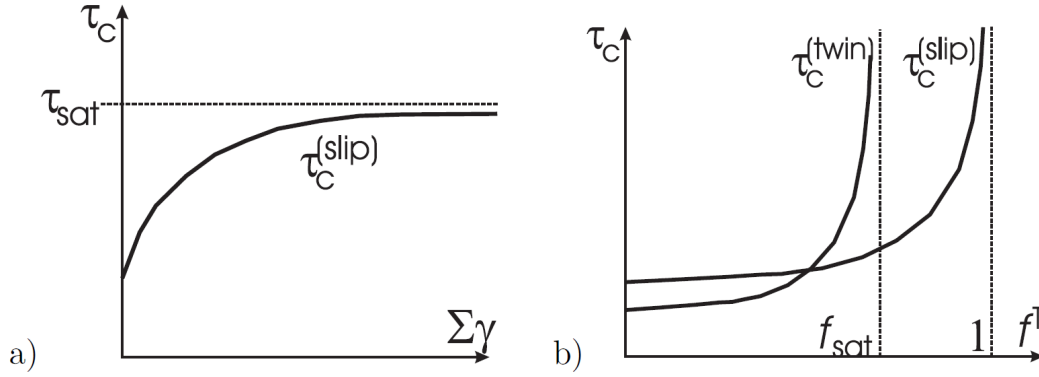
$$\begin{aligned}\dot{\tau}_c^r &= H_{(ts)}^r \sum_{q=1}^M h_{rq}^{(ts)} \dot{\gamma}^q + H_{(tt)}^r \sum_{q=2M+1}^{2M+N} h_{rq}^{(tt)} \dot{\gamma}^q, \\ &\text{gdzie } r > 2M,\end{aligned}\quad (2.31)$$

i  $\dot{\gamma}^q = \dot{\gamma}^q + \dot{\gamma}^{q+M}$ . Równanie 2.30 określa wzrost naprężeń krytycznych na systemach poślizgu ( $q \in (1, M)$ ), a równanie 2.31 na systemach bliźniakowania ( $q \in (2M + 1, 2M + N)$ ). Funkcje  $H_{(ss)}^r$  opisują umocnienie danego systemu poślizgu na skutek aktywności innych systemów poślizgu:

$$H_{(ss)}^r = h_0^{ss} \left( 1 - \frac{\tau_c^r}{\tau_{sat}^r} \right)^\beta. \quad (2.32)$$

Powyższe prawo zostało oparte na obserwacjach doświadczalnych. Ewolucję CRSS systemu poślizgu na skutek działalności innych systemów poślizgu przedstawia Rys. 2.3a. Początkowo następuje szybki wzrost naprężenia krytycznego, co odwzorowuje umocnienie zachodzące na skutek wzrostu gęstości dyslokacji w materiale. Wraz z rosnącym odkształceniem prędkość umocnienia spada. W ten sposób w modelu jest uwzględnione dynamiczne zdrowienie, które powoduje spadek gęstości dyslokacji (przy równocześnie dalej trwającym wzroście gęstości dyslokacji na skutek działania poślizgów). Gdy wartość CRSS zbliża się do wartości  $\tau_{sat}$  naprężenie prawie przestaje rosnąć, co odwzorowuje osiągnięcie stanu równowagi między wzrostem gęstości dyslokacji na skutek działania poślizgów i dynamicznym zdrowieniem. Wielkości  $h_0^{ss}$ ,  $\tau_{sat}^r$  i  $\beta$  są parametrami materiałowymi.

Mechanizmy umocnienia systemu poślizgu  $r$  z powodu działania bliźniakowania są złożone i jak dotąd nie są w pełni poznane (Ahn et al., 2015). Powstawaniu bliźniaków towarzyszy reorien-



Rysunek 2.3: Schemat ewolucji wartości krytycznych efektywnego naprężenia stycznego  $\tau_c$  z powodu a) aktywności systemów poślizgu i b) bliźniakowania ( $f_{sat}^{st} = 1$ ) (Kowalczyk-Gajewska, 2011).

tacja sieci opisana w sekcji „Kinematyka”. Obrót sieci może powodować, że wartości efektywnych naprężeń stycznych na systemach poślizgu o niskich CRSS (płaszczyzny poślizgu, na których ruch dyslokacji zachodzi w sposób „łatwy”) maleją. Dalsza deformacja przez poślizg w zreorientowanych fragmentach staje się w takim wypadku utrudniona, gdyż może zachodzić albo przez poślizg na „łatwych” systemach pod wpływem działania dużego naprężenia lub przez poślizg na „trudnych” systemach. Taki mechanizm umocnienia nazywa się umocnieniem teksturowym, które w TPK jest uwzględnione przez procedurę reorientacji. W równaniach opisujących umocnienie jest natomiast uwzględniony mechanizm Halla-Petcha (Hall, 1951; Petch, 1953) polegający na skróceniu średniej drogi, którą przebywają dyslokacje mobilne. Droga ta jest skracana przez pojawiające się na drodze dyslokacji granice bliźniacze. Umocnienie systemu poślizgu na skutek działania bliźniakowania opisuje sformułowana na podstawie (Karaman et al., 2000) funkcja:

$$H_{(st)}^r = \frac{h_0^{st}}{\tau_c^r} \left( \frac{f^{TW}}{f_{sat}^{st} - f^{TW}} \right). \quad (2.33)$$

$h_0^{st}$  i  $f_{sat}^{st}$  są parametrami materiałowymi.  $f_{sat}^{st}$  określa udział objętościowy bliźniaków, przy którym CRSS na danym systemie poślizgu rośnie do nieskończoności.  $f^{TW}$  jest aktualnym udziałem objętościowym bliźniaków. Ewolucję naprężenia krytycznego  $\tau_c^{(slip)}$  dla systemu poślizgu w przypadku, gdy  $f_{sat}^{st} = 1$  przedstawia Rys. 2.3b.

Umocnienie systemu bliźniakowania na skutek działania systemów poślizgu jest pomijane lub modelowane w uproszczony sposób za pomocą liniowego prawa ( $H_{(ts)}^r = const$ ). Umocnienie systemu bliźniakowania na skutek działania bliźniakowania jest modelowane podobnie jak w równaniu 2.33:

$$H_{(tt)}^r = \frac{h_0^{tt}}{\tau_c^r} \left( \frac{f^{TW}}{f_{sat}^{tt} - f^{TW}} \right). \quad (2.34)$$

W powyższym równaniu  $h_0^{tt}$  i  $f_{sat}^{tt}$  są parametrami materiałowymi. Ewolucję naprężenia krytycznego  $\tau_c^{(twin)}$  dla systemu bliźniakowania przedstawia Rys. 2.3b.

W modelu plastyczności krysztalów używanym w MES zostało zaimplementowane prawo umocnienia Voce i uproszczone w stosunku do relacji 2.33 i 2.34 prawo umocnienia ze względu na aktywność bliźniakowania. Wprowadzone uproszczenie miało na celu zapewnienie lepszej stabilności numerycznej rozwiązania MES. W przypadku prawa Voce funkcja  $H(\Gamma)$  jest określona

za pomocą wyrażeń:

$$H(\Gamma) = \frac{d\tau(\Gamma)}{d\Gamma}, \quad \tau(\Gamma) = \tau_0 + (\tau_1 + \theta_1\Gamma) \left(1 - \exp\left(-\Gamma \frac{\theta_0}{\tau_1}\right)\right), \quad (2.35)$$

$$\Gamma = \int \dot{\Gamma} dt, \quad \dot{\Gamma} = \sum_r |\dot{\gamma}^r|. \quad (2.36)$$

Analogiczne równania obowiązują dla umocnienia bliźniakowania od poślizgu. Można pokazać, że oba sformułowania prawa umocnienia są sobie równoważne, jeżeli  $\beta$  w 2.32 jest równe jeden, a  $\theta_1$  w 2.35 jest równe zero. W przypadku umocnienia od bliźniakowania funkcja  $H(f^{TW})$ , w miejsce zależności 2.33 i 2.34, wyraża się wzorem:

$$H(f^{TW}) = \theta_1 \frac{f^{TW}}{f_{sat} - f^{TW}}. \quad (2.37)$$

#### *Aktywności systemów*

W kolejnych rozdziałach prezentowane będą wykresy chwilowej względnej aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowanego bliźniakowania. Efektywna aktywność systemu  $s$  w danym kroku obliczeniowym była liczona przez dzielenie przyrostu ścinania na tym systemie przez sumę przyrostów ścinań na wszystkich systemach:

$$\alpha^s = \frac{\Delta\gamma^s}{\sum_r \Delta\gamma^r}. \quad (2.38)$$

Z kolei zakumulowane bliźniakowanie może być liczone na dwa sposoby. W sposobie pierwszym zakumulowane bliźniakowanie jest uzyskiwane przez dodawanie, w każdym kroku obliczeniowym, ścinania zachodzącego na skutek bliźniakowania traktowanego jako pseudo-poślizg dzielonego przez charakterystyczną wielkość ścinania dla danej rodziny systemów bliźniakowania. Drugi sposób polega na policzeniu udziału objętościowego zreorientowanych fragmentów.

## Rozdział 3

# Dwuskalowy model mikromechaniczny polikryształu

Dwuskalowy model mikromechaniczny (2SCP - ang. two-scale crystal plasticity) został zastosowany do modelowania rozwoju tekstury i odpowiedzi mechanicznej metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej poddanych procesom intensywnej deformacji plastycznej. W modelu tym wyróżniamy poziom agregatu polikrystalicznego i poziom pojedynczego kryształu, por. Rys. 3.1. Na poziomie agregatu zadaje się składowe gradientu prędkości lub tensora naprężenia. Model plastyczności kryształów (PK) opisujący zachowanie pojedynczego kryształu został przedstawiony w poprzednim rozdziale. Wykorzystywane jest sformułowanie prędkościowe, w którym zaniedbuje się odkształcenia sprężyste ( $\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e$ ). W konsekwencji  $\mathbf{D}^{(k)} = \mathbf{D}^{(k).p}$ . W pierwszych dwóch sekcjach bieżącego rozdziału zostaną omówione schematy przejścia mikro-makro pomiędzy dwoma poziomami mikrostruktury. Kolejna sekcja zawiera opis doboru parametrów modelu plastyczności kryształów w oparciu o wyniki eksperymentalne dla polikryształów stopu magnezu AZ31b i czystego tytanu. W ostatniej sekcji zostaną zaprezentowane wyniki modelowania rozwoju mikrostruktury stopu AZ31b i czystego tytanu w procesach ECAP (Segal, 1979, 1995) i KOBO (Korbel i Bochniak, 2003), uzyskane dla dobranych parametrów.

### 3.1 Opis modelu dwuskalowego

W modelu dwuskalowym możliwych jest kilka wariantów przejścia mikro-makro. Najprostszym wykorzystywanym schematem jest model Taylora, w którym zakłada się, że odkształcenie każdego ziarna jest takie samo, jak odkształcenie makroskopowe:

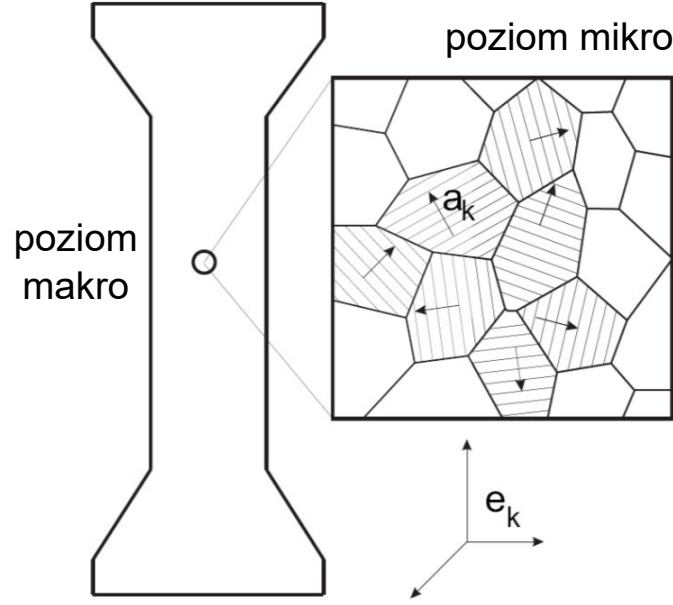
$$\mathbf{D}^{(k)} = \mathbf{D}. \quad (3.1)$$

Drugim z wykorzystywanych w rozprawie schematów przejścia mikro-makro jest model wewnętrznie zgodny, który wymaga linearyzacji lokalnego równania konstytutywnego. W zależności od wariantu sformułowania w lokalnym zlinearyzowanym równaniu konstytutywnym używa się modułu stycznego<sup>1</sup>  $\mathbb{M}^{(k),tg}$  lub siecznego  $\mathbb{M}^{(k),sec}$ . Przy założeniu linearyzacji z wykorzystaniem modułu

---

<sup>1</sup>Indeks  $(k)$  oznacza, że dany symbol opisuje wielkość na poziomie pojedynczego kryształu.





Rysunek 3.1: Schemat modelu dwuskalowego.

stycznego równanie 2.29 można zapisać następująco:

$$\mathbf{D}^{(k)} = \left\{ v_0 \sum_{r=1}^{2M+N} \text{sign}(\tau^r) \left| \frac{\mathbf{P}^r \cdot \mathbf{s}^{(k)}}{\tau_c^r} \right|^{\bar{n}-1} \left| \frac{\mathbf{P}^r \otimes \mathbf{P}^r}{\tau_c^r} \right| \right\} \mathbf{s}^{(k)} = \mathbb{M}^{(k),sec}(\mathbf{s}^{(k)}) \mathbf{s}^{(k)}, \quad (3.2)$$

gdzie tensor czwartego rzędu  $\mathbb{M}^{(k),sec}(\mathbf{s}^{(k)})$  nazywa się tensorem modułów siecznych. Z wyjątkiem przypadku  $\bar{n} = 1$  moduł sieczny  $\mathbb{M}^{(k),sec}$  zależy od dewiatora naprężenia  $\mathbf{s}^{(k)}$ . Postać 3.2-2 jest jedną z możliwych zlinearyzowanych postaci lokalnego równania konstytutywnego, otrzymywaną poprzez tzw. linearyzację sieczną. Inną zlinearyzowaną postać równania otrzymuje się poprzez rozwinięcie funkcji  $\mathbf{D}^{(k)} = f(\mathbf{s}^{(k)})$  w szereg Taylora wokół  $\bar{\mathbf{s}}^{(k)}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(k)}(\mathbf{s}^{(k)}) &= \mathbf{D}^{(k)}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial \mathbf{s}^{(k)}} \Big|_{\mathbf{s}^{(k)}=\bar{\mathbf{s}}^{(k)}} (\mathbf{s}^{(k)} - \bar{\mathbf{s}}^{(k)}) \\ &= \mathbb{M}^{(k),tg}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) \mathbf{s}^{(k)} + \mathbf{D}_0^{(k)}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}), \end{aligned} \quad (3.3)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{s}}^{(k)}$  to dewiator średniego naprężenia w ziarnie:

$$\bar{\mathbf{s}}^{(k)} = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} \mathbf{s}^{(k)} dV \quad (3.4)$$

oraz

$$\mathbb{M}^{(k),tg}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) = \bar{n} \mathbb{M}^{(k),sec}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}). \quad (3.5)$$

Można pokazać, że:

$$\mathbf{D}_0^{(k)}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) = (1 - \bar{n}) \mathbb{M}^{(k),sec}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) \bar{\mathbf{s}}^{(k)} = (1 - \bar{n}) \mathbf{D}^k(\bar{\mathbf{s}}^k). \quad (3.6)$$

Linearyzację 3.3 nazywamy linearyzacją styczną.

### 3.1.1 Sformułowanie modelu wewnętrznie zgodnego

W modelu dwuskalowym wewnętrznie zgodnym VPSC (Molinari et al., 1987; Lebensohn i Tomé, 1993; Tomé i Lebensohn, 2007) w celu uzyskania odpowiedzi agregatu polikrystalicznego jako jednorodnego ośrodka przeprowadza się homogenizację. Polega ona na zanurzeniu pojedynczego ziarna o elipsoidalnym kształcie w nieskończonym ośrodku o liniowym równaniu konstytutywnym o postaci analogicznej do 3.3:

$$\mathbf{D} = \mathbb{M}_0 \cdot \mathbf{s} + \mathbf{D}_0. \quad (3.7)$$

$\mathbb{M}_0$  i  $\mathbf{D}_0$  to odpowiednio moduł podatności i odkształcenie resztkowe ośrodka, zależne od efektywnego makroskopowego modułu podatności polikryształu  $\bar{\mathbb{M}}$  i makroskopowych odkształceń resztkowych, które początkowo nie są znane i muszą być znalezione poprzez rozwiązanie równań modelu wewnętrznie zgodnego. W sformułowaniu VPSC korzysta się z idei inkluzji ekwiwalentnej (rozwiązanie Eshelby'ego) (Mura, 1987). Zgodnie z tą ideą lokalne równanie konstytutywne 2.29 zapisuje się za pomocą modułu podatności matrycy następująco:

$$\mathbf{D}^{(k)} = \mathbb{M}_0 \cdot \mathbf{s}^{(k)} + \mathbf{D}^0 + \mathbf{D}^{(k),*}. \quad (3.8)$$

W powyższym równaniu niejednorodność nie występuje jawnie, lecz jest ukryta wewnątrz fikcyjnego tensora prędkości deformacji własnej  $\mathbf{D}^{(k),*}$ .

Zakładając, że w nieskończoności zadany jest tensor prędkości deformacji odpowiadający makroskopowemu  $\mathbf{D}$  oraz wykorzystując rozwiązanie Eshelby'ego można pokazać, że zależność między naprężeniem i prędkością deformacji na poziomie pojedynczego ziarna a odpowiednimi wielkościami makroskopowymi opisuje równanie interakcji (Hill, 1965b):

$$\mathbf{D}^{(k)} - \mathbf{D} = -\mathbb{M}^* \left( \boldsymbol{\sigma}^{(k)} - \boldsymbol{\sigma} \right), \quad (3.9)$$

gdzie  $\mathbb{M}^*$  jest tensorem interakcji (tensorem Hilla):

$$\mathbb{M}^*(\mathbb{M}_0) = (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} \cdot \mathbb{S} \cdot \mathbb{M}_0 \quad (3.10)$$

$\mathbb{I}$  jest tensorem jednostkowym czwartego rzędu, a  $\mathbb{S}$  jest tensorem Eshelby'ego zależnym od tensora podatności ośrodka  $\mathbb{M}_0$  oraz kształtu elipsoidalnej inkluzji reprezentującej pojedyncze ziarno.

Następnie zakłada się, że między makroskopową prędkością odkształcenia  $\mathbf{D}$  oraz dewiatorem makroskopowego tensora naprężenia  $\boldsymbol{\sigma}$  zachodzi liniowa zależność postaci:

$$\mathbf{D} = \bar{\mathbb{M}} \cdot \mathbf{s} + \bar{\mathbf{D}}_0, \quad (3.11)$$

gdzie  $\bar{\mathbb{M}}$  i  $\bar{\mathbf{D}}_0$  to efektywny makroskopowy moduł polikryształu i odpowiednie odkształcenie resztkowe. Wykorzystując powyższe równanie, jedną ze zlinearyzowanych postaci równania lokalnego 3.2, równanie interakcji 3.9 oraz

$$\langle \mathbf{D}^{(k)} \rangle = \bar{\mathbf{D}}, \quad (3.12)$$

otrzymujemy wyrażenie na makroskopowy moduł podatności

$$\bar{\mathbb{M}} = \langle \mathbb{M}^{(k)} \mathbb{B}^{(k)} \rangle, \quad (3.13)$$

gdzie

$$\mathbb{B}^{(k)} = \left( \mathbb{M}^{(k)} + \mathbb{M}_0^* \right)^{-1} \left( \bar{\mathbb{M}} + \mathbb{M}_0^* \right). \quad (3.14)$$

Należy zauważyć, że jest to równanie uwikłane, ponieważ  $\mathbb{B}^{(k)}$  zależy od  $\bar{\mathbb{M}}$ . Wyznaczenie  $\bar{\mathbb{D}}_0$  jest konieczne, ponieważ układ równań 3.2, 3.9 i 3.13 uzupełniany jest zależnością:

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma}^{(k)} \rangle. \quad (3.15)$$

### 3.1.2 Warianty przejścia mikro-makro

Poszczególne warianty modelu wewnętrznie zgodnego różnią się zależnością między modułem  $\mathbb{M}_0$  i  $\bar{\mathbb{M}}$  oraz przyjętym wariantem linearyzacji lokalnego równania konstytutywnego 2.29. W kodzie VPSC (Lebensohn i Tomé, 1993; Tomé i Lebensohn, 2007), oprócz modelu Taylora zaimplementowano warianty: sieczny (Hutchinson, 1976), afiniczny (Masson et al., 2000; Lebensohn et al., 2003, 2004) i styczny (Molinari et al., 1987; Lebensohn i Tomé, 1993) modelu wewnętrznie zgodnego (self-consistent). Tensor modułów siecznych  $\mathbb{M}^{(k),sec}$  na poziomie pojedynczego ziarna ( $k$ ) został już przedstawiony w równaniu 3.2 i po przeprowadzeniu linearyzacji wyraża się przez średni dewiator naprężenia w ziarnie  $k$ , to znaczy:

$$\mathbb{M}^{(k),sec}(\bar{\mathbf{s}}^{(k)}) = v_0 \sum_{r=1}^{2M+N} \text{sign}(\tau^r) \left| \frac{\mathbf{P}^r \cdot \bar{\mathbf{s}}^{(k)}}{\tau_c^r} \right|^{\bar{n}-1} \left| \frac{\mathbf{P}^r \otimes \mathbf{P}^r}{\tau_c^r} \right|. \quad (3.16)$$

Tensor modułów stycznych na poziomie pojedynczego ziarna jest uzyskiwany z rozwinięcia równania 2.29 w szereg Taylora wokół  $\bar{\mathbf{s}}^{(k)}$ :

$$\mathbb{M}^{(k),aff} = \mathbb{M}^{(k),tg} = \bar{n}\mathbb{M}^{(k),sec} = \bar{n}v_0 \sum_{r=1}^{2M+N} \text{sign}(\tau^r) \left| \frac{\mathbf{P}^r \cdot \bar{\mathbf{s}}^{(k)}}{\tau_c^r} \right|^{\bar{n}-1} \left| \frac{\mathbf{P}^r \otimes \mathbf{P}^r}{\tau_c^r} \right|. \quad (3.17)$$

Efektywny reszkowy tensor prędkości deformacji w wariacie afinicznym jest równy:

$$\mathbf{D}^{(k),0} = \left( \mathbb{M}^{(k),sec} - \mathbb{M}^{(k),aff} \right) \bar{\mathbf{s}}^{(k)} = (1 - \bar{n})\mathbf{D}^{(k)}. \quad (3.18)$$

Dla poszczególnych wariantów modelu VPSC przyjmowane są następujące założenia w odniesieniu do  $\mathbb{M}_0$ ,  $\bar{\mathbb{M}}$  i linearyzacji równania lokalnego.

- 1) W wariacie **siecznym** lokalne równanie jest linearyzowane przy wykorzystaniu modułów siecznych, zaś równanie 3.7 oraz zależność między  $\bar{\mathbb{M}}$  i  $\mathbb{M}_0$  mają postać

$$\mathbf{D} = \bar{\mathbb{M}}_1^{sec} \cdot \mathbf{s}, \quad (3.19)$$

gdzie  $\mathbb{M}_0 = \bar{\mathbb{M}}_1^{sec}$ , a zatem relacja 3.13 ma formę:

$$\bar{\mathbb{M}}_1^{sec} = \langle \mathbb{M}^{(k),sec} \mathbb{B}_1^{(k),sec} \rangle, \quad (3.20)$$

gdzie

$$\mathbb{B}_1^{(k),sec} = \left( \mathbb{M}^{(k),sec} + \mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}_1^{sec} \right) \right)^{-1} \left( \bar{\mathbb{M}}_1^{sec} + \mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}_1^{sec} \right) \right). \quad (3.21)$$

- 2) W wariacie **afinicznym** lokalne równanie jest linearyzowane przy wykorzystaniu modułów stycznych, zaś równanie 3.7 oraz zależność między  $\bar{\mathbb{M}}$  i  $\mathbb{M}_0$  mają postać

$$\mathbf{D} = \bar{\mathbb{M}}^{tg} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{D}_0, \quad (3.22)$$

gdzie

$$\mathbb{M}_0 = \bar{\mathbb{M}}^{tg}, \quad (3.23)$$

a zatem relacja 3.13 ma formę:

$$\bar{\mathbb{M}}^{tg} = \left\langle \mathbb{M}^{(k),tg} \mathbb{B}_1^{(k),tg} \right\rangle, \quad (3.24)$$

gdzie

$$\mathbb{B}^{(k),tg} = \left( \mathbb{M}^{(k),tg} + \mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}^{tg} \right) \right)^{-1} \left( \bar{\mathbb{M}}^{tg} + \mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}^{tg} \right) \right). \quad (3.25)$$

- 3) W wariancie **stycznym** lokalne równanie jest linearyzowane przy wykorzystaniu modułów siecznych, zaś równanie 3.7 oraz zależność między  $\bar{\mathbb{M}}$  i  $\mathbb{M}_0$  mają postać:

$$\mathbf{D} = \bar{\mathbb{M}}_2^{sec} \cdot \mathbf{s}, \quad (3.26)$$

gdzie  $\mathbb{M}_0 = n\bar{\mathbb{M}}_2^{sec} = \bar{\mathbb{M}}_2^{tg}$ , a zatem relacja 3.13 ma formę:

$$\bar{\mathbb{M}}_2^{sec} = \left\langle \mathbb{M}^{(k),sec} \mathbb{B}_2^{(k),sec} \right\rangle, \quad (3.27)$$

oraz

$$\mathbb{B}_2^{(k),sec} = \left( \mathbb{M}^{(k),sec} + n\mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}_2^{sec} \right) \right)^{-1} \left( \bar{\mathbb{M}}_2^{sec} + n\mathbb{M}^* \left( \bar{\mathbb{M}}_2^{sec} \right) \right). \quad (3.28)$$

Z analizy równania interakcji 3.9 wynika, że im mniejszy moduł podatności, tym mniejsze będzie odchylenie tensora prędkości deformacji na poziomie ziarna od wartości uśrednionej po polikryształ. W związku z tym, dla  $n \rightarrow \infty$  przybliżenie rozwiązania w wariancie stycznym dąży do modelu Sachsa (Sachs, 1928), w którym w każdym ziarnie panuje takie samo naprężenie jak na poziomie makroskopowym. Z kolei w wariancie siecznym dla  $n \rightarrow \infty$  odpowiedź materiału jest zbliżona do modelu Taylora. Wariant afiniczny nawet dla  $n \rightarrow \infty$  przewiduje odpowiedź pośrednią między modelem Taylora i Sachsa.

## 3.2 Dobór parametrów modelu

### 3.2.1 Dobór parametrów modelu czystego tytanu deformowanego w procesach ECAP i KOBO

Przeprowadzenie deformacji czystego tytanu w temperaturze pokojowej jest trudne. Warto wspomnieć o pomyślnej próbie wykonania procesu ECAP dla czystego tytanu w temperaturze pokojowej (Jäger et al., 2015). Przeprowadzenie procesu wymagało w tym wypadku skomplikowanych działań takich jak użycie dodatkowego tłoka od strony wyjścia kanału (ang. back pressure) czy zamknięcie próbki tytanu w stalowym opakowaniu w celu zredukowania tarcia. Z tego powodu eksperymenty, z którymi porównywane były rezultaty symulacji prezentowane w niniejszej rozprawie zostały wykonane w podwyższonych temperaturach. Wyniki eksperymentalne dotyczące rozwoju tekstury były opublikowane w (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015). Procesy ECAP i KOBO były przeprowadzone w temperaturach odpowiednio 300 i 400°C<sup>2</sup>. Z tego powodu w rozprawie parametry tytanu ustalono w oparciu o wyniki prób eksperymentalnych wykonywanych w podwyższonych temperaturach zamieszczone w pracy Zeng et al. (2009b). Przy kalibracji korzystano również z dostępnej w literaturze wiedzy na temat działających systemów poślizgu i bliźniakowania. W zakresie

<sup>2</sup>Próbka bezpośrednio przed procesem była podgrzana w piecu do temperatury 450°C, natomiast temperatura prasy wynosiła 400°C.

Tablica 3.1: Parametry dwuskalowego modelu plastyczności kryształów dobrane dla czystego tytanu deformowanego w temperaturze 300°C w procesie ECAP. W celu zwięzłości opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: prism. (pryzmatyczny), basal (bazalny), 1. pyr. <c+a> (piramidalny <c+a> pierwszego rzędu), T1 (bliźniakowanie rozciągające T1), slip (poślizg) i twin (bliźniakowanie).

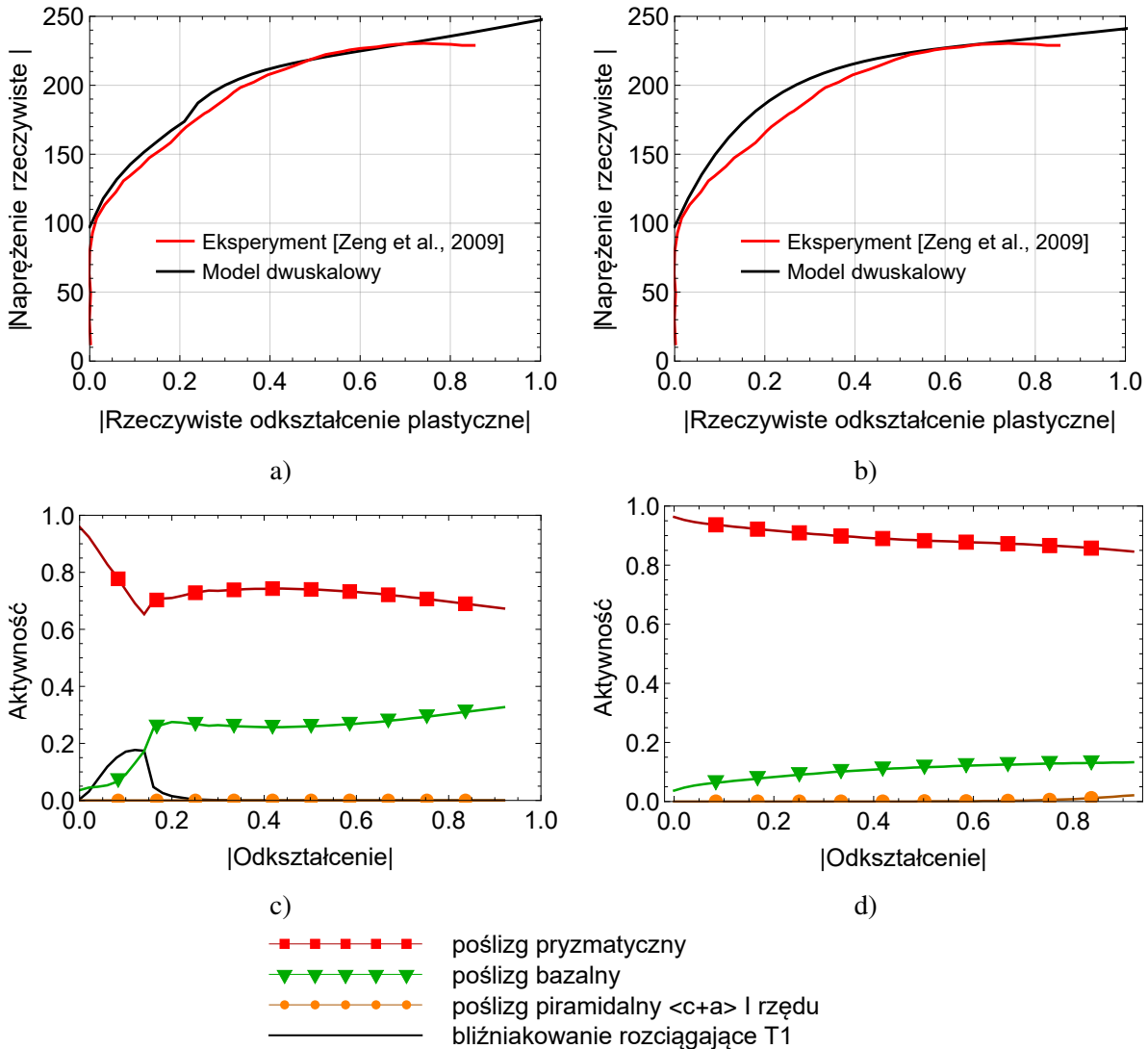
| System       | Oddziaływanie | $\tau_{c0}$<br>[MPa] | $h_0$<br>[MPa] | $\beta$ | $\tau_{sat}/f_{sat}$<br>[MPa]/- | $\mu$<br>- | $q$    |       |                   |
|--------------|---------------|----------------------|----------------|---------|---------------------------------|------------|--------|-------|-------------------|
|              |               |                      |                |         |                                 |            | prism. | basal | pyr <c+a><br>twin |
| prism.       | slip-slip     | 25                   | 250            | 1       | 50                              | 2.0        | 1.0    | 1.0   | 1.0               |
|              | slip-twin     | —                    | 0              | —       | 1.0                             | —          |        | 10.0  |                   |
| basal        | slip-slip     | 30                   | 250            | 1       | 55                              | 1.5        | 1.0    | 1.0   | 1.0               |
|              | slip-twin     | —                    | 0              | —       | 1.0                             | —          |        | 10.0  |                   |
| 1. pyr <c+a> | slip-slip     | 140                  | 250            | 1       | 250                             | 2.0        | 1.0    | 1.0   | 1.0               |
|              | slip-twin     | —                    | 0              | —       | 2.0                             | —          |        | 2.0   |                   |
| T1           | twin-slip     | —                    | 1              | 1       | 1                               | —          | 1.0    | 1.0   | 1.0               |
|              | twin-twin     | 45                   | 10             | —       | 0.3                             | 2.0        |        | 10.0  |                   |

temperatur, w których były przeprowadzone oba procesy poślizg po płaszczyznach pryzmatycznych  $\{10\bar{1}0\}$  jest łatwiejszy niż poślizg po płaszczyznach bazalnych  $\{0001\}$  (Numakura i Koiwa, 1998). Ponadto, najłatwiej aktywowanym systemem bliźniakowania jest system T1  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ . Piramidalny system poślizgu pierwszego rzędu <c+a>  $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$  również może być aktywowany, ale zwykle wymaga większych naprężeń niż systemy bazalny i pryzmatyczny.

W celu symulacji rozwoju tekstury w procesie ECAP przyjęto, że aktywne mogą być 3 rodziny systemów poślizgu: poślizgi pryzmatyczne  $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ , bazalne  $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$  i piramidalne <c+a> pierwszego rzędu  $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$  oraz bliźniakowanie T1  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ . Parametry systemów dobrane w celu dopasowania kształtu krzywej ściskania na gorąco przedstawione są w Tab. 3.1, natomiast zestawienie krzywych eksperymentalnej i uzyskanej w symulacji na rysunku 3.2a. Aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania przedstawia rysunek 3.2c.

Proces KOBO był prowadzony w wyższej temperaturze niż proces ECAP. Wysoka temperatura zwykle ogranicza powstawanie bliźniaków, por. np. Nemat-Nasser et al. (1999). Bliźniaków nie zaobserwowano również w mikrostrukturze uzyskanej w procesie KOBO. Brak widocznych bliźniaków po procesie KOBO nie oznacza, że nie mogły one powstać w początkowych etapach a następnie zostać zdeformowane lub podzielone w stopniu uniemożliwiającym ich obserwację, szczególnie zważywszy na bardzo duże deformacje uzyskiwane w procesie KOBO. Jednakże, w odróżnieniu od (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015) w niniejszej rozprawie uznano, że bliźniakowanie nie będzie brane pod uwagę w analizie procesu KOBO, ponieważ: i) proces zachodzi w podwyższonej temperaturze i pod wysokim ciśnieniem, ii) z powodu bardzo dużych deformacji zachodzących w procesie wpływ bliźniakowania, które zwykle ma miejsce w początkowych stadiach deformacji jest niewielki. Przyjęto zatem, że materiał deformuje się przez poślizg na systemach analogicznych do przyjętych dla symulacji procesu ECAP. Wyniki dopasowania krzywej przedstawiono na rysunku 3.2b, a zestaw parametrów przyjętych do modelowania w tabeli 3.2. Względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania przedstawia rysunek 3.2d.

Należy tu zauważyć, że nie wszystkie szczegóły eksperymentalnych krzywych naprężenie-odkształcenie zostały odwzorowane z użyciem dobranych parametrów. W przypadku parametrów dobranych dla procesu ECAP następuje nagłe zakończenie bliźniakowania (poprzez ograniczenie



Rysunek 3.2: Porównanie krzywych rzeczywiste napężenie-rzeczywiste odkształcenie plastyczne (wartości bezwzględne) i aktywności systemów dla próby ściskania na gorąco (400°C) próbki z czystego tytanu. a) Porównanie z doświadczeniem krzywych napężenie-odkształcenie dobranych w celu symulacji procesu ECAP. b) Porównanie z doświadczeniem krzywych napężenie-odkształcenie dobranych w celu symulacji procesu KOB. c) i d) Względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania uzyskane w symulacjach.

Tablica 3.2: Parametry dwuskalowego modelu plastyczności kryształów dobrane dla czystego tytanu deformowanego w temperaturze ok. 400°C w procesie KOB. W celu zwięzłości opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: prism. (pryzmatyczny), basal (bazalny), 1. pyr.  $\langle c+a \rangle$  (piramidalny  $\langle c+a \rangle$  pierwszego rzędu) i slip (poślizg).

| System                       | Oddziaływanie | $\tau_{c0}$<br>[MPa] | $h_0$<br>[MPa] | $\beta$ | $\tau_{sat}$<br>[MPa]/- | $\mu$<br>- | $q$    |       |                           |
|------------------------------|---------------|----------------------|----------------|---------|-------------------------|------------|--------|-------|---------------------------|
|                              |               |                      |                |         |                         |            | prism. | basal | pyr $\langle c+a \rangle$ |
| prism.                       | slip-slip     | 25                   | 200            | 1       | 60                      | 2.0        | 1.0    | 1.0   | 1.0                       |
| basal                        | slip-slip     | 30                   | 200            | 1       | 63                      | 1.5        | 1.0    | 1.0   | 1.0                       |
| 1. pyr $\langle c+a \rangle$ | slip-slip     | 90                   | 400            | 1       | 130                     | 2.0        | 1.0    | 1.0   | 1.0                       |

maksymalnego udziału objętościowego bliźniaków do poziomu  $f_{sat} = 0,3$ ), co skutkuje skokiem naprężenia nie obserwowanym w eksperymencie. W eksperymencie zaobserwowano, że bliźniakowanie ma istotny wpływ na krzywą, mianowicie powoduje wzrost prędkości umocnienia, por. (Zeng et al., 2009b). Mechanizmy do tego prowadzące były dyskutowane w sekcji 2.3. W szczególności, występują trzy fazy umocnienia (Nemat-Nasser et al., 1999; Zeng et al., 2009b): i) spadek prędkości umocnienia, ii) wzrost prędkości umocnienia, iii) spadek prędkości umocnienia. W przypadku braku bliźniakowania (np. przy wysokich temperaturach i niskich prędkościach odkształcenia lub przy występowaniu tekstury niekorzystnej dla powstawania bliźniaków) faza ii nie występuje. Skok związany z zakończeniem działania bliźniakowania nie był obserwowany w eksperymencie, gdzie charakter przejścia między fazami umocnienia był raczej płynny. Wydaje się więc, że w celu poprawnego modelowania umocnienia następującego wskutek działania bliźniakowania w czystym tytanie należy zmodyfikować prawo umocnienia dla bliźniakowania. Przy pominięciu działania bliźniakowania (parametry dla procesu KOB0) występuje ciągły spadek prędkości umocnienia, co również nie oddaje zachowania eksperymentalnej próbki. Zdecydowano się jednak użyć do modelowania procesów ECAP i KOB0 dobranych w powyżej opisany sposób parametrów z powodu braku dostępu do bardziej dokładnych danych eksperymentalnych wykonywanych w podwyższonej temperaturze. Dane takie w szczególności powinny zawierać tekstury i krzywe naprężenie-odkształcenie uzyskane dla materiału pierwotnego i poddanego odkształceniom w różnych kierunkach<sup>3</sup>. Ponadto, dokładne odwzorowanie kształtu krzywej nie jest konieczne, ponieważ w przypadku modelowania procesów SPD odkształcenia są na tyle duże, że wartości CRSS dla systemów poślizgu osiągają wartości nasycenia. Dlatego przede wszystkim istotne są wartości nasycenia dla CRSS i ich wzajemny stosunek, szczególnie biorąc pod uwagę to, że interesującym dla autora rezultatem symulacji procesów SPD za pomocą modelu dwuskalowego była tekstura krystalograficzna materiału, na którą ewolucja parametrów umocnienia poszczególnych systemów ma w tym przypadku niewielki wpływ.

### 3.2.2 Dobór parametrów modelu stopu AZ31b

W przypadku komercyjnego stopu magnezu AZ31b możliwe było dobranie parametrów w oparciu o wyniki badań eksperymentalnych przeprowadzonych w instytucie autora rozprawy. Wykonano wielokierunkowe testy rozciągania i ściskania próbek wyciętych w wyciskanego pręta i walcowanej blachy ze stopu AZ31b, również ze zmianą ścieżki odkształcenia. Badania odpowiedzi mechanicznej próbek wyciętych z walcowanego pręta zostały wykonane przez zespół doktora Michała Maja. Badania odpowiedzi mechanicznej próbek wyciętych z walcowanej blachy zostały wykonane przez zespół profesora Kowalewskiego (Libura et al., 2016b). Materiał przed rozpoczęciem testów mechanicznych był przez 2 godziny wygrzewany w temperaturze 350°C. Krzywe naprężenie-odkształcenie mierzono zarówno przy użyciu standardowych metod, jak i metodą cyfrowej korelacji obrazu (DIC – ang. digital image correlation). Pomiary tekstury materiału przed i po deformacji wykonano za pomocą dyfraktometru rentgenowskiego firmy Bruker D8 Discover stosując filtrowane promieniowanie  $Co K\alpha$  na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej.

#### *Wyniki eksperymentalne dla wyciskanego pręta*

W celu oceny, jakie systemy poślizgu i bliźniakowania działają w polikryształach z silną teksturą poddanym obciążeniu w różnych kierunkach, oraz w celu oceny wpływu wstępnej deformacji na powstawanie bliźniaków i co za tym idzie zmianę odpowiedzi materiału ulegającego dalszej deformacji, analizowano następujące próby eksperymentalne (Rys. 3.3a-i przedstawia schematy dla każdego z poniższych punktów a-i):

<sup>3</sup>Takie próby zostały wykonane dla stopu AZ31b, dlatego parametry dla tego materiału zostały dobrane w sposób bardziej dokładny. Procedura doboru i jej wyniki są przedstawione w kolejnej sekcji.

- Ściskanie do zniszczenia w trzech kierunkach:
  - a) Ściskanie do zniszczenia w kierunku wyciskania ED (ang. – extrusion direction) – **S-0<sup>4</sup>**.
  - b) Ściskanie do zniszczenia w kierunku prostopadłym do ED – **S-90**.
  - c) Ściskanie do zniszczenia w pod kątem 45° do ED – **S-45**.
- Ściskanie ze zmianą kierunku ze wstępnym odkształceniem 2%:
  - d) Wstępne odkształcenie 2% uzyskano poprzez ściskanie w kierunku ED. Następnie wykonano:
    - e) ściskanie wstępnie ściskanej próbki w kierunku prostopadłym do ED – **S2-90**,
    - f) ściskanie wstępnie ściskanej próbki pod kątem 45° do ED – **S2-45**.
- Ściskanie ze zmianą kierunku ze wstępnym odkształceniem 4%:
  - g) Wstępne odkształcenie 4% uzyskano poprzez ściskanie w kierunku ED. Następnie wykonano:
    - h) ściskanie wstępnie ściskanej próbki w kierunku prostopadłym do ED – **S4-90**,
    - i) ściskanie wstępnie ściskanej próbki pod kątem 45° do ED – **S4-45**.

Każdą z eksperymentalnych prób wykonywano dla 3-4 próbek, mierząc przemieszczenie i siłę. Po ustaleniu, że wyniki są powtarzalne, wykonano dodatkowo dla każdego przypadku jedną próbę, w której odkształcenia były mierzone za pomocą techniki DIC. Powtarzalność wyników była weryfikowana przez porównanie wartości przemieszczenia tłoka i siły z poprzednio wykonanymi pomiarami. Prędkość odkształcenia w próbach wynosiła 0.001/s.

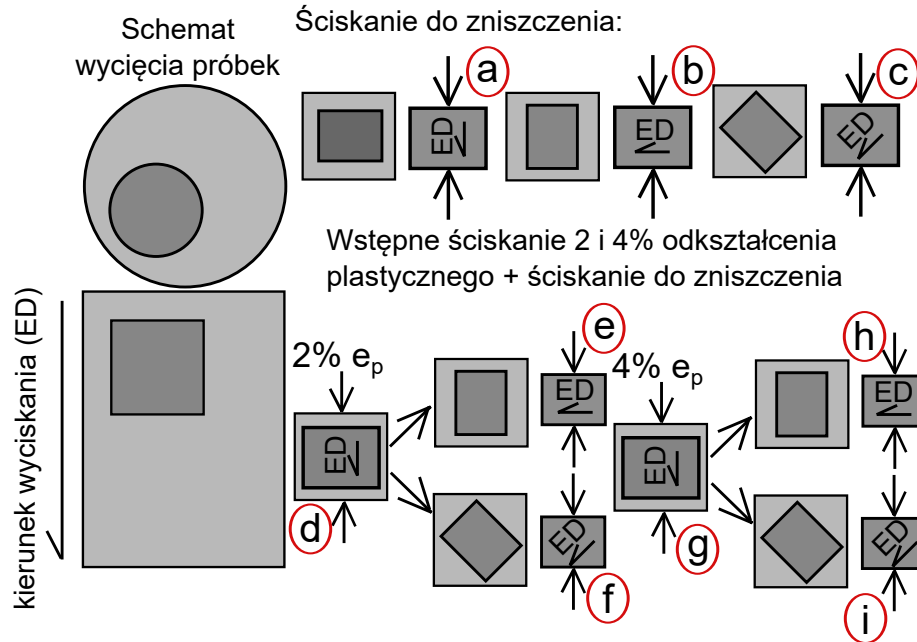
Rysunek 3.4 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  uzyskane dla:

- a) próbki przed deformacją po wygrzaniu w temperaturze 350° przez 2 godziny,
- b) próbki ściskanej w kierunku ED do poziomego odkształcenia plastycznego ok. 2%, por. Rys. 3.3d,
- c) próbki ściskanej w kierunku ED do poziomego odkształcenia plastycznego ok. 4%, por. Rys. 3.3g,
- d) próbki wstępnie ściskanej do ok. 4% odkształcenia plastycznego, a następnie ściskanej do 3,5% odkształcenia w kierunku prostopadłym do wstępnego ściskania (ED), por. Rys. 3.3h
- e) próbki wstępnie ściskanej do ok. 4% odkształcenia plastycznego, a następnie ściskanej do 3,5% odkształcenia w kierunku pod kątem 45° do wstępnego ściskania (ED), por. Rys. 3.3i

Jak widać, materiał przed deformacją charakteryzuje się silną teksturą (por. Rys. 3.4a), w której normalne do płaszczyzn bazalnych  $\{0001\}$  kryształów są w przybliżeniu prostopadłe do kierunku ED i rozłożone dość równomiernie dookoła osi pręta, choć tekstura w pewnym stopniu odbiega od spodziewanej osiowej symetrii (próbka była pobrana ze środka wyciskanego pręta). Na podstawie otrzymanych wyników można zauważyć, że w próbkach ściskanych do poziomego odkształcenia plastycznego ok. 2% (por. Rys. 3.4b) i 4% (por. Rys. 3.4c) proces odkształcenia doprowadził do wytworzenia podobnego charakteru tekstury, gdzie lokalne maksima przyjmują podobne wartości. W przypadku ściskania do poziomego 2% odkształcenia analiza ilościowa wykazała obecność

<sup>4</sup>W dalszej części tekstu zamiennie do pełnego opisu używane będą skróty: S-0,S-90,S-45,S2-90,S2-45,S4-90,S4-45.



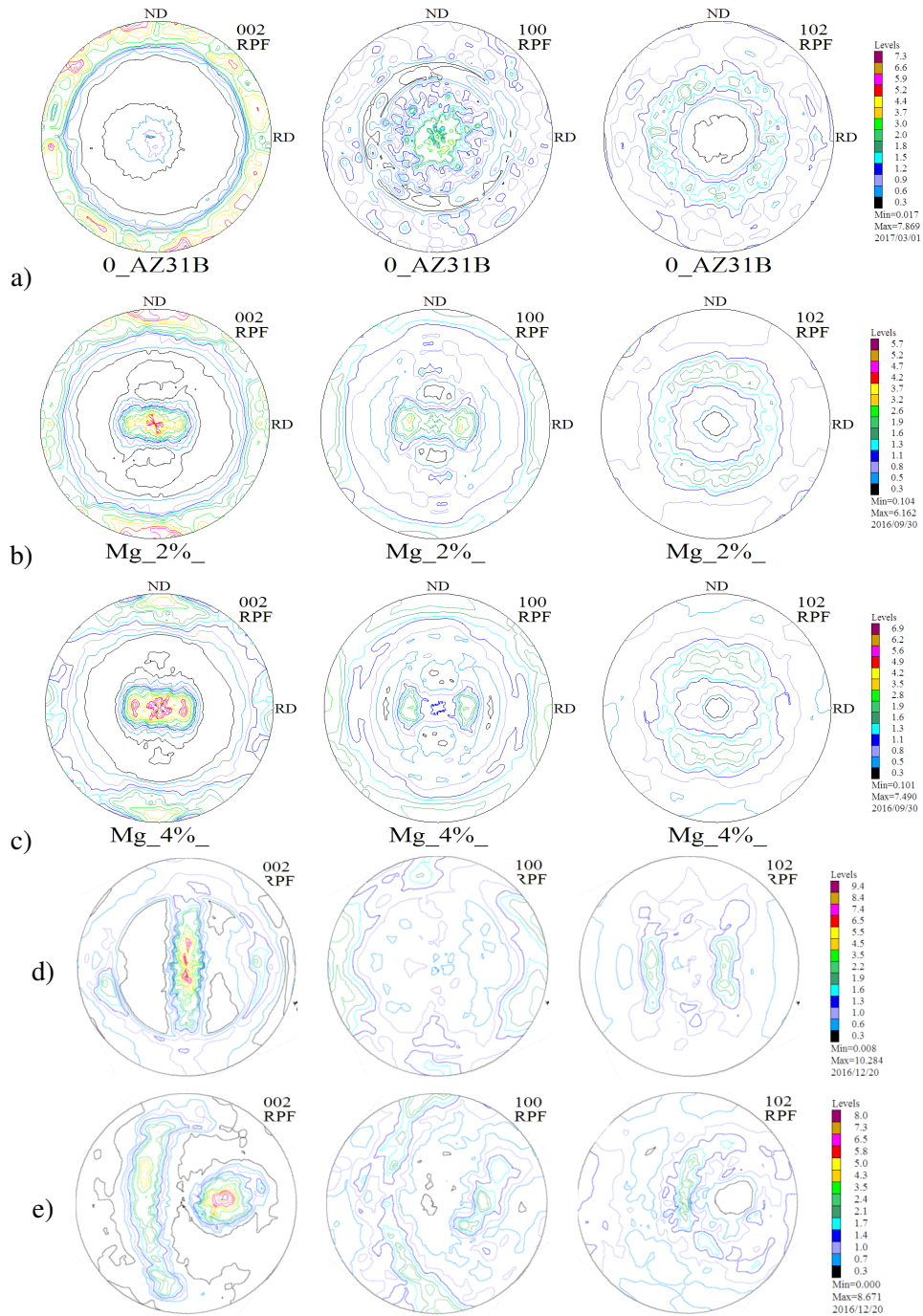


Rysunek 3.3: Schemat prób eksperymentalnych wykonanych dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta ze stopu AZ13b.

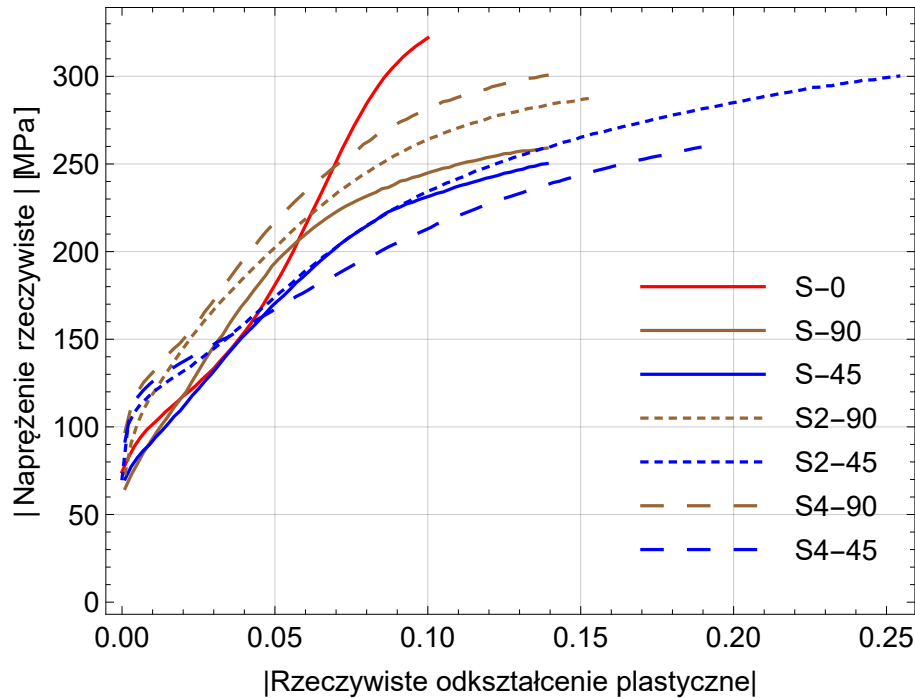
składowej  $\{0001\}$  zajmującej około 23% objętości wszystkich składowych. Przy dalszym ścisnieniu do poziomu 4% odkształcenia udział objętościowy tej składowej wzrósł do poziomu 40%. W materiale nieodkształconym w ogóle nie zidentyfikowano tej składowej. Tak intensywne zmiany tekstury występujące przy stosunkowo niewielkim odkształceniu można przypisać działaniu bliźniakowania, które prowadzi do reorientacji sieci krystalicznej. Wiadomo, że najczęściej występującym systemem bliźniakowania dla stopu AZ31b w temperaturze pokojowej jest bliźniakowanie rozciągające T1  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ , które prowadzi od obrotu sieci krystalicznej o około  $90^\circ$ . Za występowaniem tego typu bliźniaków przemawia też fakt korzystnego zorientowania wstępnej tekstury dla jego działania. Gdy następuje reorientacja sieci na skutek bliźniakowania T1, komórka kryształu ulega wydłużeniu w kierunku osi „c” przed reorientacją, a skróceniu w kierunku do niej prostopadłym. Ścisnienie próbki o teksturze wyciskanego pręta prowadzi do takiej właśnie deformacji na poziomie pojedynczego kryształu.

Rysunek 3.5 przedstawia krzywe naprężenie rzeczywiste - rzeczywiste odkształcenie plastyczne uzyskane techniką DIC dla próbek eksperymentalnych. Zgodnie z powszechnie przyjętym standardem odkształcenie rzeczywiste zostało obliczone jako logarytm naturalny stosunku odkształconej długości odcinka do jego długości nieodkształconej. Naprężenie rzeczywiste jest stosunkiem mierzonej siły do rzeczywistego (odkształconego) pola powierzchni przekroju próbki, obliczonego przy założeniu nieściśliwości materiału. Rzeczywiste odkształcenie plastyczne uzyskano przez odjęcie od rzeczywistego odkształcenia naprężenia rzeczywistego podzielonego przez moduł Younga wyznaczony dla początkowej części krzywej. Na rysunku pokazane zostały wartości bezwzględne tak wyznaczonych wielkości. Największa wartość naprężenia, ale również najmniejsze odkształcenie zniszczenia, występuje przy ścisnieniu w kierunku ED (S-0). Na krzywej wyraźnie widać trzy fazy umocnienia:

- I spadek prędkości umocnienia,
- II wzrost prędkości umocnienia,
- III spadek prędkości umocnienia.



Rysunek 3.4: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  uzyskane na przekrojach poprzecznych ściskanych próbek przy użyciu analizy XRD. Figury wykonane dla tekstury a) wstępnej, b) po ściskaniu do ok.  $2\% \epsilon_p$ , c) po ściskaniu do ok.  $4\% \epsilon_p$ , d) po wstępnym ściskaniu do ok.  $4\% \epsilon_p$  i kolejnym do  $3,5\% \epsilon_p$  w kierunku prostopadłym do ED, e) po wstępnym ściskaniu do ok.  $4\% \epsilon_p$  i kolejnym do  $3,5\% \epsilon_p$  pod kątem  $45^\circ$  do ED.  $\epsilon_p$  – odkształcenie plastyczne w kierunku danego ściskania.



Rysunek 3.5: Krzywe naprężenie rzeczywiste – rzeczywiste odkształcenie plastyczne (wartości bezwzględne) uzyskane za pomocą techniki cyfrowej korelacji obrazu w próbach doświadczalnych ściskania dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta ze stopu AZ31b.

Według (Salem et al., 2006; Ahn et al., 2015) faza I jest podobna do odpowiedzi materiału deformującego się przez poślizg, a spadek prędkości umocnienia jest związany z dynamicznym zdrowieniem. Początek fazy II związany jest natomiast z początkiem bliźniakowania. Umocnienie na skutek działania bliźniakowania jest tłumaczone różnymi mechanizmami, m. in. mechanizmem Halla-Petcha i umocnieniem teksturowym (obrót sieci kryształów do „trudnych” orientacji). Powyższe obserwacje są zgodne z badaniami tekstury, według których przy ścisnaniu próbki w kierunku ED większość ziaren ulega bliźniakowaniu.

W przypadku krzywych dla ściskania pod kątem  $45^\circ$  do ED (S-45) również można zauważyć obecność trzech faz umocnienia, nie jest ona jednak tak wyraźna, jak w przypadku krzywej S-0. Wydaje się więc, że bliźniakowanie zachodzi również przy ścisnaniu w tym kierunku, ale w mniejszym zakresie niż w przypadku ściskania w kierunku ED. Przy ścisnaniu próbki o silnej, opisanej wyżej teksturze pod kątem  $45^\circ$  do kierunku ED tylko część ziaren ma orientację umożliwiającą łatwe zachodzenie bliźniakowania T1 (a więc wydłużenie komórki w kierunku „c” i skrócenie w kierunku prostopadłym). Dla przypadku ściskania w kierunku prostopadłym do ED jeszcze mniej ziaren może łatwo ulegać bliźniakowaniu, co powoduje, że faza II w tym przypadku jest praktycznie niewidoczna.

Wstępne ściskanie do poziomu 2 i 4% odkształcenia plastycznego w każdym przypadku powoduje wzrost granicy plastyczności. W pewnym stopniu może być to konsekwencją umocnienia zachodzącego na systemach poślizgu, wydaje się jednak, że wzrost naprężeń potrzebnych do odkształcenia plastycznego jest spowodowany zachodzącym w czasie wstępnego ściskania bliźniakowaniem.

Przy dokładniejszym przyjrzeniu się rysunkowi 3.5 widać, że granica plastyczności w materiale poddanym poprzednio odkształceniu 4% jest wyższa niż w materiale poddanym początkowo

odkształceniu 2%. W przypadku ściskania w kierunku prostopadłym do ED naprężenia dla krzywej S4-90 cały czas pozostają większe niż naprężenia dla krzywej S2-90, co jest zgodne z intuicją. Co ciekawe, dla krzywych S4-45 i S2-45 zależność (dla odkształceń powyżej 3%) jest odwrotna. Co więcej w przypadku S2-45 osiągnięte zostały nie tylko większe naprężenia niż dla krzywej S4-45, ale również w próbie tej odnotowano największe odkształcenie (ok. 26%).

#### *Wyniki eksperymentalne dla walcowanej blachy*

W przypadku badania próbek wyciętych z walcowanej blachy za podstawę doboru parametrów modelu służyły próby:

- 1) rozciąganie do zniszczenia (osiągnięto odkształcenie rzeczywiste 17,5%),
- 2) ściskanie do odkształcenia rzeczywistego ok. 10% i następnie rozciąganie do zniszczenia.

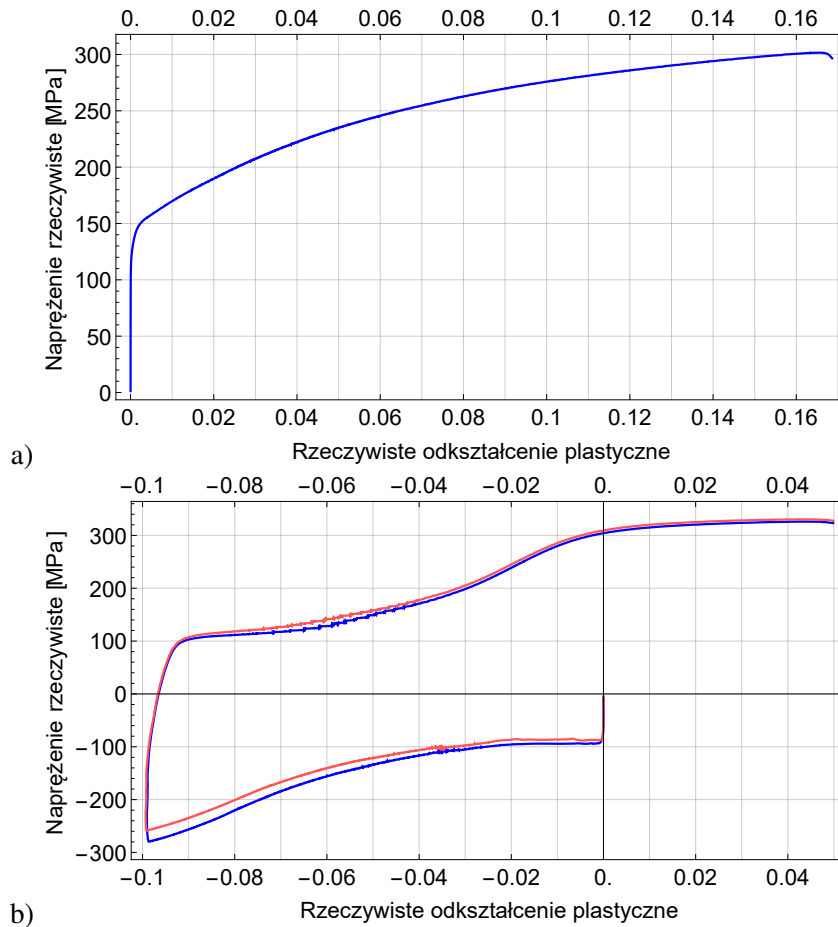
Ściskanie blachy przeprowadzono z użyciem przyrządu przeciwwyboczeniowego opracowanego przez prof. Dietricha (Libura et al., 2016a). Próby były wykonywane w płaszczyźnie blachy, w kierunku walcowania (RD – rolling direction). Eksperymentalne krzywe naprężenie-odkształcenie przedstawia Rys. 3.6. Odkształcenie plastyczne uzyskano przyjmując moduł Younga ok. 40 GPa. W przypadku ściskania i kolejnego rozciągania wykonano dwie próby. Jak widać, poziom naprężeń w obu próbach tylko nieznacznie od siebie odbiega, por. Rys. 3.6b. Krzywa na Rys. 3.6a charakteryzuje się ciągłym spadkiem prędkości umocnienia, co jest charakterystyczne dla deformacji przez poślizg. Z kolei krzywe na Rys. 3.6b wykazują etap związany ze wzrostem prędkości umocnienia, który jest przypisywany działaniu bliźniakowania.

Na Rys. 3.7 przedstawiono figury biegunowe uzyskane dla materiału przed i po deformacji. Jak widać, wstępna tekstura materiału jest typową teksturą walcowanej blachy. Jest to tzw. tekstura bazalna, w której oś „c” większości kryształów jest w przybliżeniu prostopadła do płaszczyzny blachy. Z tekstury powstałej po rozciąganiu można wywnioskować, że materiał deformował się głównie przez poślizgi na płaszczyznach niebazalnych. W stopach magnezu najniższych efektywnych naprężeń stycznych wymaga uruchomienie poślizgu po płaszczyznach bazalnych, ale w rozważanym przypadku efektywne naprężenie styczne na tych płaszczyznach było bliskie zeru z powodu silnej tekstury bazalnej. W związku z tym ruch dyslokacji nastąpił na innych płaszczyznach poślizgu.

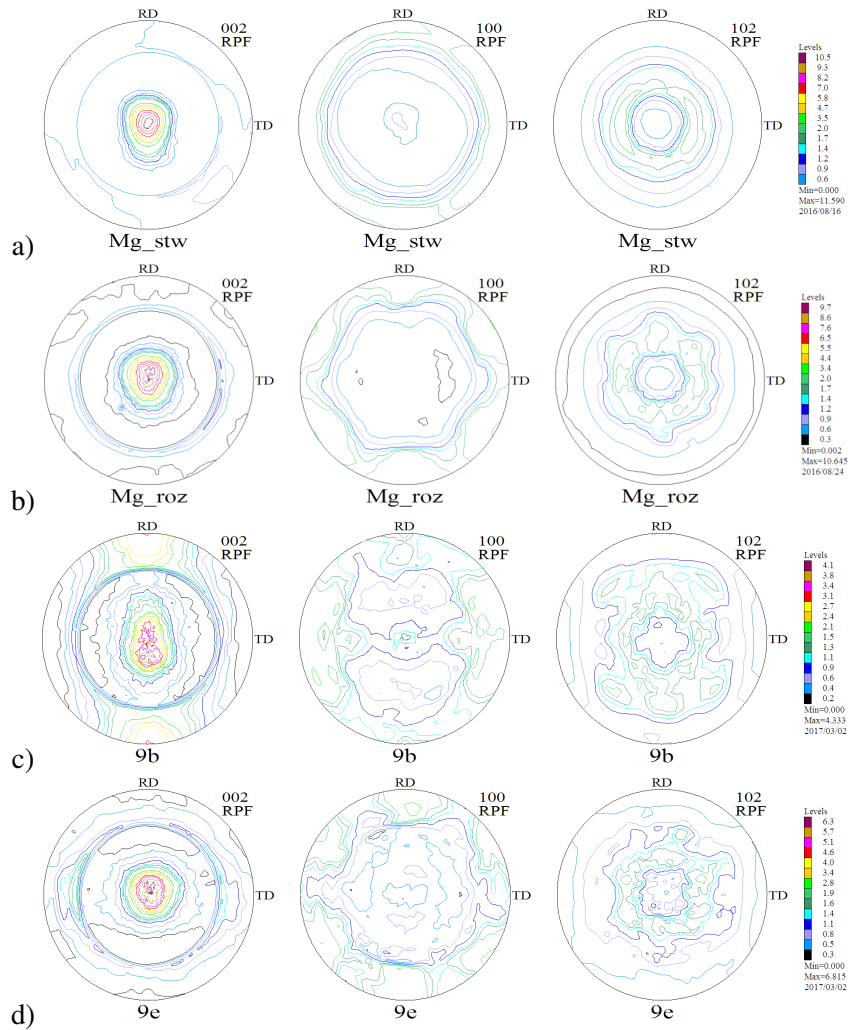
#### *Algorytm genetyczny*

Dobieranie parametrów modelu poprzez ich bezpośrednią modyfikację przez użytkownika w oparciu o wiedzę i doświadczenie ma wiele zalet, m.in. możliwość doboru parametrów w kontrolowany, dający wgląd w działające mechanizmy i prawa umocnienia nimi rządzący sposób. Takie podejście (nazywane dalej interaktywnym) wykorzystano w celu doboru parametrów modelu czystego tytanu, jak również we wstępnych próbach doboru takich optymalnych parametrów dla stopu AZ31b. Podejście interaktywne jest jednak bardzo czasochłonne, jak również wymaga działania użytkownika od nowa, w przypadku np. uzyskania nowych wyników eksperymentalnych lub korekty błędnych wyników uzyskanych wcześniej. Z tego względu w celu uzyskania optymalnych parametrów zdecydowano się wykorzystać algorytm genetyczny. Zaletą takiego algorytmu jest jego potencjał do pokonywania lokalnych minimów. Wadą jest brak informacji, czy dany zestaw parametrów jest rzeczywiście optymalny.

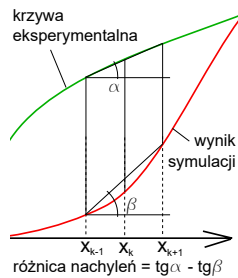
W celu dobrania parametrów użyto własnej implementacji algorytmu genetycznego w języku Python w oparciu o algorytm opisany w pracy (Skippon et al., 2012). Działanie algorytmu opiera się na obserwowanym w świecie przyrody zjawisku doboru naturalnego. Z tego powodu do jego opisu używa się pojęć „pokolenie”, „osobnik” i „mutacja”. W celu zawężenia przestrzeni poszukiwań oraz w celu uzyskania parametrów zgodnych z fizyką w algorytmie należało zadać przedziały,



Rysunek 3.6: Krzywe napężenie rzeczywiste - rzeczywiste odkształcenie plastyczne uzyskane w próbach eksperymentalnych dla próbek wyciętych z walcowanej blachy AZ31b. Wyniki były uzyskane w próbach a) rozciągania i b) ściskania i kolejnego rozciągania.



Rysunek 3.7: Figury biegunowe  $\{0002\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  uzyskane dla próbek wyciętych z walcowanej blachy w stanie a) przed deformacją, b) po rozciągnięciu, c) po ścisnieniu 4% odkształcenia, d) po wstępnym ścisnieniu 4%, odciążeniu i rozciągnięciu 4%.



Rysunek 3.8: Schemat obliczenia różnicy nachyleń krzywych dla każdego z punktów  $x_k$ .

w których mogą znajdować się wartości szukanych parametrów. W algorytmie należało również zadać liczbę  $N_{ind}$  (ang. ind – individual) osobników. Każdy osobnik to zestaw parametrów. W pierwszym pokoleniu parametry dla każdego z osobników były losowane w zakresie wstępnie zadanych przedziałów. Następnie dla każdego z osobników wykonywane były symulacje modelem dwuskalowym. Wyniki symulacji były potem porównywane z wynikami eksperymentalnymi. Porównywane były krzywe naprężenie - odkształcenie. Porównanie miało na celu dobranie zarówno poziomów naprężeń, jak i kształtu krzywych. Miarę niezgodności poziomu naprężeń uzyskanych w symulacji z wynikami eksperymentu stanowiła suma wartości bezwzględnych różnic naprężeń na obu krzywych w oddalonych od siebie o stałą wartość odkształcenia punktach. Miara niezgodności kształtu krzywych równała się zsumowanym po punktach krzywej różnicom nachyleń obu krzywych. Do obliczenia nachylenia w danym punkcie pod uwagę brane były wartości z punktów sąsiednich, por. Rys. 3.8. Po wykonaniu obliczeń w danym pokoleniu ustalane były osobniki najlepiej dopasowane, tzn. takie, dla których miary niezgodności były najniższe. Liczba najlepiej dopasowanych osobników  $N_{hri}$  (hri – ang. highest ranked individuals) była ustalana z góry. Następnie spośród zbioru najlepiej dobranych osobników losowane były pary. Liczba par była równa liczbie osobników  $N_{ind}$ . Dla każdej z par uzyskiwany był jeden potomek. Parametry potomka były uzyskiwane przez:

- a) dziedziczenie – każdy z parametrów nowego osobnika był obliczany jako

$$N_{ch} = \alpha N_{p1} + (1 - \alpha) N_{p2},$$

gdzie  $N_{p1}$  i  $N_{p2}$  oznaczały wartości danego parametru dla rodziców, a  $\alpha$  było losowane z przedziału (0,1)

- b) mutację – każdy parametr nowego osobnika mógł z prawdopodobieństwem  $P_{mut}$  ulec mutacji. Parametr był wtedy niezależny od wartości parametrów rodziców i losowany z początkowo zadanego przedziału.

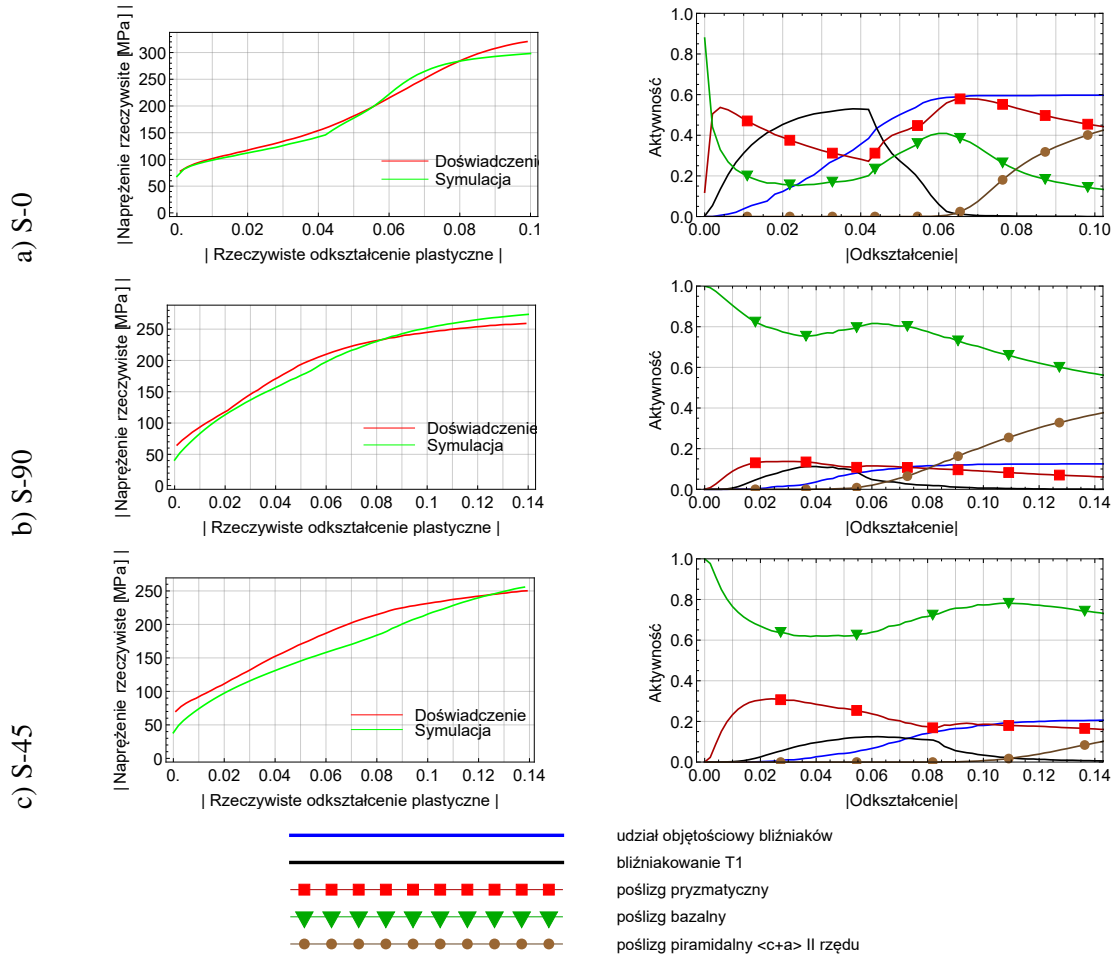
Po przeliczeniu symulacji dla zadanej początkowo liczby pokoleń  $N_{gen}$  (gen. – ang. generation), osobnik z najniższą miarą niezgodności był traktowany jako optymalny zestaw parametrów.

#### *Dobór parametrów w oparciu o wyniki eksperymentu dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta*

Przeprowadzono kilka prób doboru parametrów modelu wykorzystując algorytm genetyczny opisany w poprzedniej sekcji. Procedury przeprowadzono dla  $N_{ind} = 40$  osobników i  $N_{gen} = 90$  pokoleń. Po przeprowadzeniu symulacji w każdym pokoleniu wybierane było  $N_{hri} = 8$  najlepiej dopasowanych osobników. Prawdopodobieństwo mutacji  $P_{mut}$  wynosiło 0,02. Przy optymalizacji brana była pod uwagę zgodność krzywych naprężenie-odkształcenie uzyskanych w symulacji i doświadczeniu.

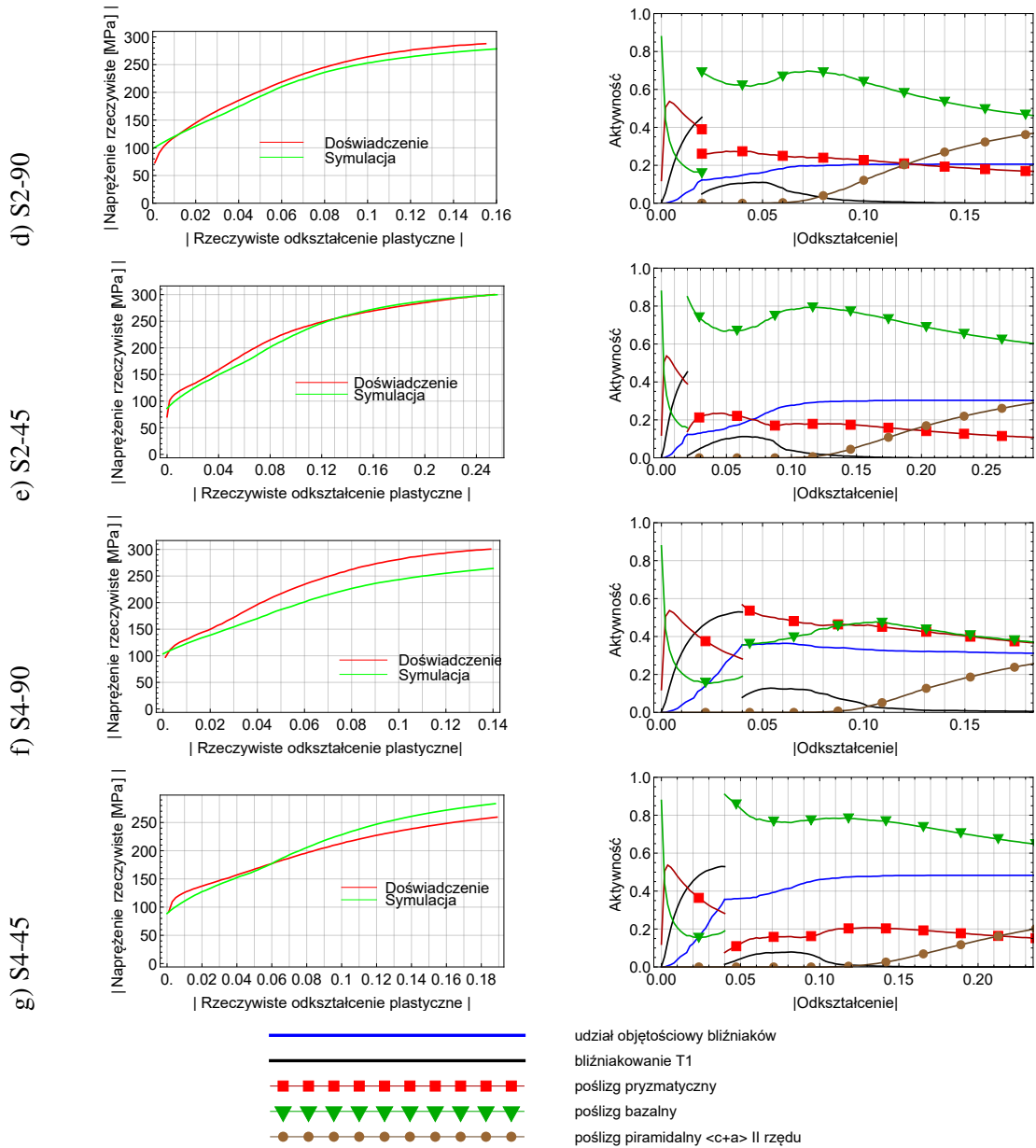
Parametry uzyskane w wyniku optymalizacji przedstawia Tab. 3.3. Rys. 3.9 przedstawia zestawienie krzywych naprężenie-odkształcenie (wartości bezwzględne) uzyskanych w symulacji i próbie eksperymentalnej (lewa kolumna) oraz względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania (prawa kolumna). Przy pomocy algorytmu genetycznego udało się uzyskać bardzo dobrą zgodność poziomów naprężeń dla większości prób eksperymentalnych. Zmiany nachylenia krzywych (czyli zmiany prędkości umocnienia) zostały odwzorowane również dość dobrze, choć w tym wypadku, szczególnie w przypadku aktywności bliźniakowania pojawiają się większe rozbieżności. Powodem tego może być niedostatecznie dokładny model umocnienia na skutek bliźniakowania. Warto jednak zauważyć, że przewidywana aktywność bliźniakowania jest zgodna z wcześniejszymi obserwacjami poczynionymi na podstawie analizy eksperymentalnie mierzonych tekstur.

Na rysunku 3.10 przedstawiono zestawienie krzywych naprężenie-odkształcenie uzyskanych dla zoptymalizowanych parametrów modelu dwuskalowego. W celu ułatwienia porównania, ozna-



Rysunek 3.9: Porównanie symulowanych krzywych naprężenie-odkształcenie i aktywności systemów dla próbek z pręta stopu AZ31b. Lewa kolumna: krzywe naprężenie rzeczywiste - rzeczywiste odkształcenie plastyczne (wartości bezwzględne) uzyskane w próbach eksperymentalnych i za pomocą zoptymalizowanych parametrów modelu dwuskalowego dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta ze stopu AZ31b. Prawa kolumna: aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania uzyskane w symulacjach. Wyniki były uzyskane dla: a) ściskania w kierunku wyciskania ED, b) ściskania w kierunku prostopadłym do ED, c) ściskania pod kątem  $45^\circ$  do ED, d) ściskania wstępnie ściskanej (ED 2%) próbki w kierunku prostopadłym do ED, e) ściskania wstępnie ściskanej (ED 2%) próbki pod kątem  $45^\circ$  do ED, f) ściskania wstępnie ściskanej (ED 4%) próbki w kierunku prostopadłym do ED i g) ściskania wstępnie ściskanej (ED 4%) próbki pod kątem  $45^\circ$  do ED.





Rysunek 3.9: Ciąg dalszy.

Tablica 3.3: Parametry dwuskalowego modelu plastyczności kryształu wyznaczone dla stopu AZ31b w oparciu o wyniki uzyskane dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta. Mając na celu zwięzłość opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: prism. (pryzmatyczny), basal (bazalny), 2. pyr. <c+a> (piramidalny <c+a> drugiego rzędu) i slip (poślizg).

| System       | Oddziaływanie | $\tau_{c0}$<br>[MPa] | $h_0$<br>[MPa] | $\beta$ | $\tau_{sat}/f_{sat}$<br>[MPa]/- | $\mu$<br>- | $q$    |       |                   |
|--------------|---------------|----------------------|----------------|---------|---------------------------------|------------|--------|-------|-------------------|
|              |               |                      |                |         |                                 |            | prism. | basal | pyr <c+a><br>twin |
| prism.       | slip-slip     | 32,42                | 132,03         | 1,0     | 422,04                          | 0,82       | 1,42   | 1,37  | 1,6               |
|              | slip-twin     | —                    | 1,22           | —       | 1,32                            | —          |        | 1,5   |                   |
| basal        | slip-slip     | 8,7                  | 114,8          | 1,0     | 502,04                          | 1,15       | 1,08   | 1,33  | 1,25              |
|              | slip-twin     | —                    | 1,45           | —       | 1,39                            | —          |        | 1,45  |                   |
| 2. pyr <c+a> | slip-slip     | 113,67               | 137,67         | 1,0     | 1813,53                         | 1,36       | 1,4    | 1,79  | 1,51              |
|              | slip-twin     | —                    | 1,23           | —       | 1,06                            | —          |        | 1,67  |                   |
| T1           | twin-slip     | —                    | 0,0            | 1,0     | 94,0                            | —          | 1,14   | 1,46  | 1,37              |
|              | twin-twin     | 45,33                | 0,55141        | —       | 0,58                            | 0,62       |        | 1,34  |                   |

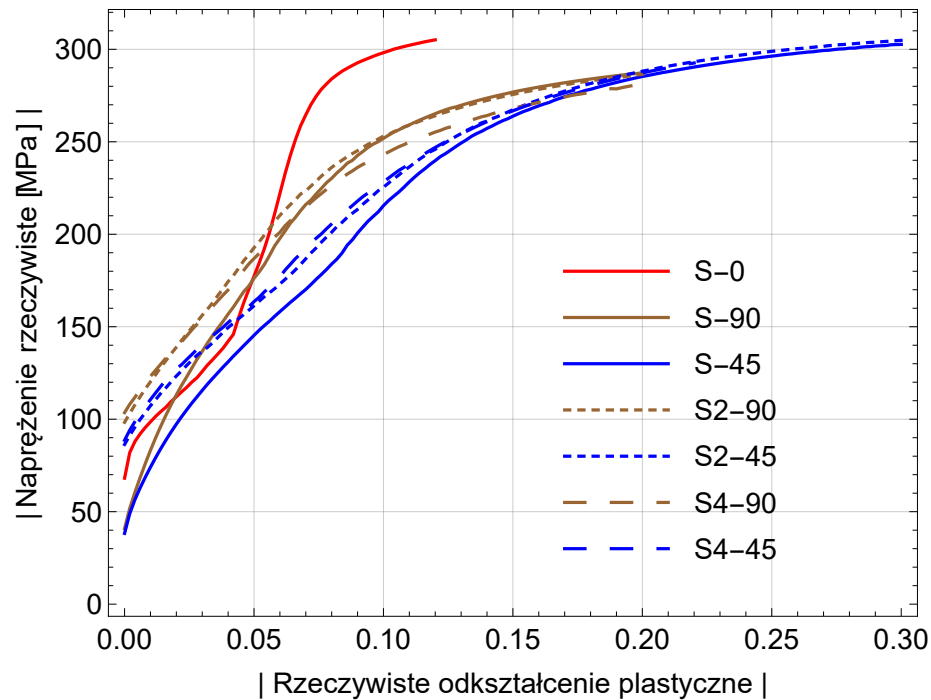
czenia są analogiczne do oznaczeń na rysunku 3.5. Udało się odwzorować pewne kluczowe efekty, takie jak największa prędkość umocnienia dla krzywej S-0 oraz wzrost granicy plastyczności po wstępnym ściskaniu. Nie udało się niestety odwzorować względnych wartości naprężeń dla dużych odkształceń między krzywymi z różnym poziomem wstępnego ściskania. Dla krzywych S-90, S2-90 i S4-90 w eksperymencie zaobserwowano wzrost maksymalnego naprężenia ze wzrostem odkształcenia przy wstępnym ściskaniu, natomiast w symulacjach można zaobserwować tendencję odwrotną. Z kolei dla krzywych S-45, S2-45 i S4-45 w symulacji otrzymano bardzo zbliżone wartości maksymalnego naprężenia, podczas gdy w eksperymencie obserwowano znaczne różnice.

Rys. 3.11 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  odpowiadające eksperymentalnie mierzonym figurom z Rys. 3.4. Za pomocą zoptymalizowanych parametrów udało się uzyskać dobrą zgodność *przewidywanych* tekstur (optymalizacja dotyczyła tylko kształtu krzywych) z wynikami eksperymentalnymi.

Na Rys. 3.11 przedstawiono figury biegunowe rzutowane na płaszczyznę przekroju próbki, w analogii do Rys. 3.4. W przypadkach a-c płaszczyzna ta jest tożsama z płaszczyzną przekroju poprzecznego początkowego pręta, natomiast w przypadkach d i e płaszczyzna przekroju próbki jest względem niej obrócona odpowiednio o  $90^\circ$  i  $45^\circ$ . W celu łatwiejszej oceny rozwoju tekstury wykonano również projekcje stereograficzne tekstury w przypadkach d i e na płaszczyznę przekroju poprzecznego początkowego pręta i przedstawiono je odpowiednio na Rys. 3.12a i b. Deformacja przez poślizg na poziomie 3,5% była zbyt mała, by tekstura uzyskana po wstępnym ściskaniu (por. 3.11c) uległa znaczącej ewolucji. Bliźniakowanie działało w ograniczonym stopniu (porównaj przewidywane modelem aktywności mechanizmu bliźniakowania na Rys. 3.9 dla kolejnych prób) i skutki jego działania nie są w znaczącym stopniu widoczne na figurach biegunowych. Widoczna jest niewielka asymetria względem osi pręta, spowodowana obciążeniem w innym kierunku niż obciążenie początkowe.

#### *Dobór parametrów w oparciu o wyniki eksperymentu dla próbek wyciętych z walcowanej blachy*

W celu ustalenia parametrów w oparciu o wyniki dla próbek wyciętych z blachy również przeprowadzono symulację z użyciem algorytmu genetycznego. Parametry *algorytmu* były takie same, jak w przypadku poprzednim, z wyjątkiem liczby pokoleń, która wynosiła 120. Zoptymalizowane



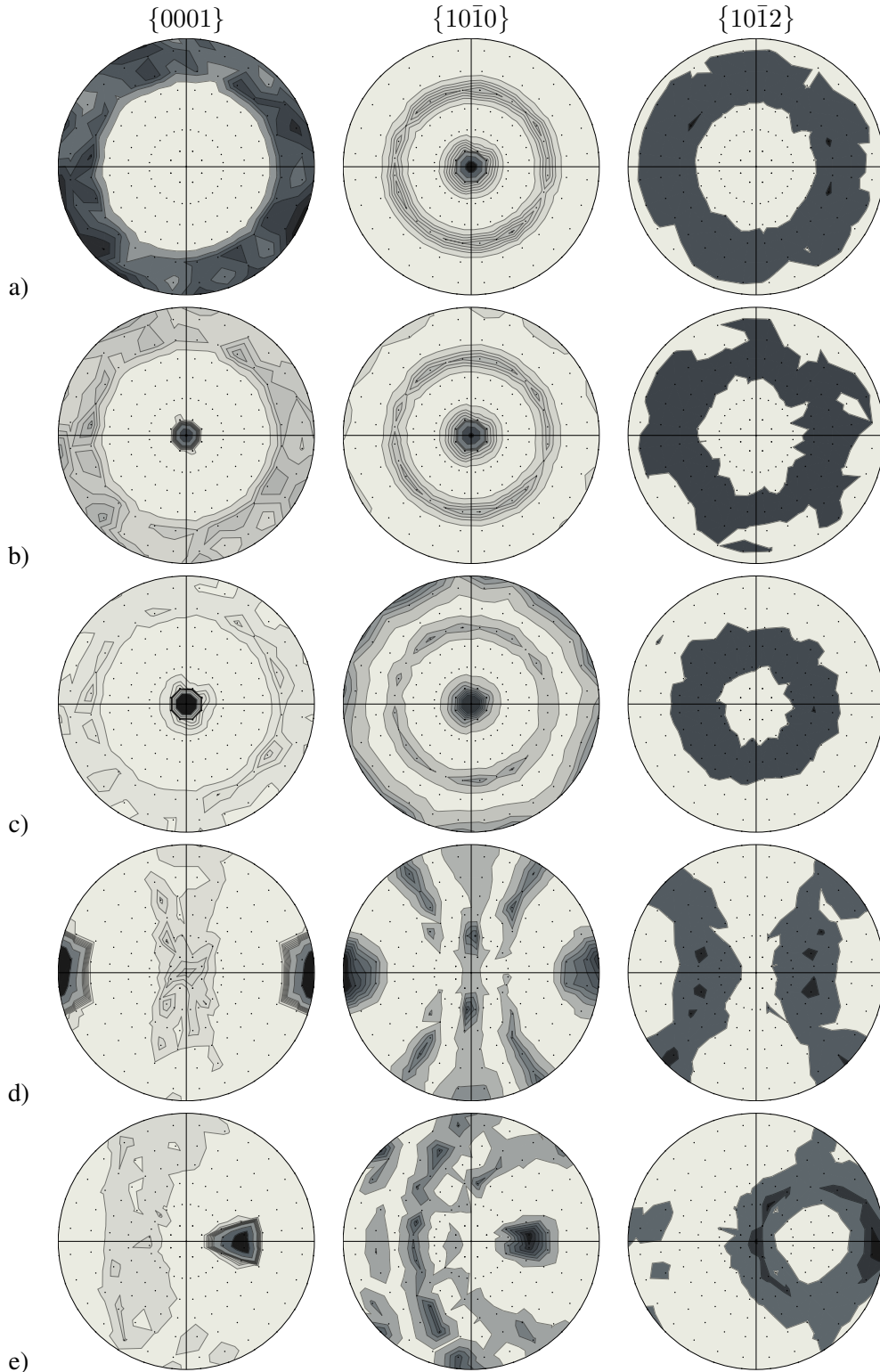
Rysunek 3.10: Krzywe napężenie rzeczywiste – rzeczywiste odkształcenie plastyczne (wartości bezwzględne) uzyskane w symulacjach za pomocą parametrów wyznaczonych za pomocą algorytmu genetycznego, dla próbek wyciętych z pręta ze stopu AZ31b.

parametry *modelu* przedstawia Tab. 3.4

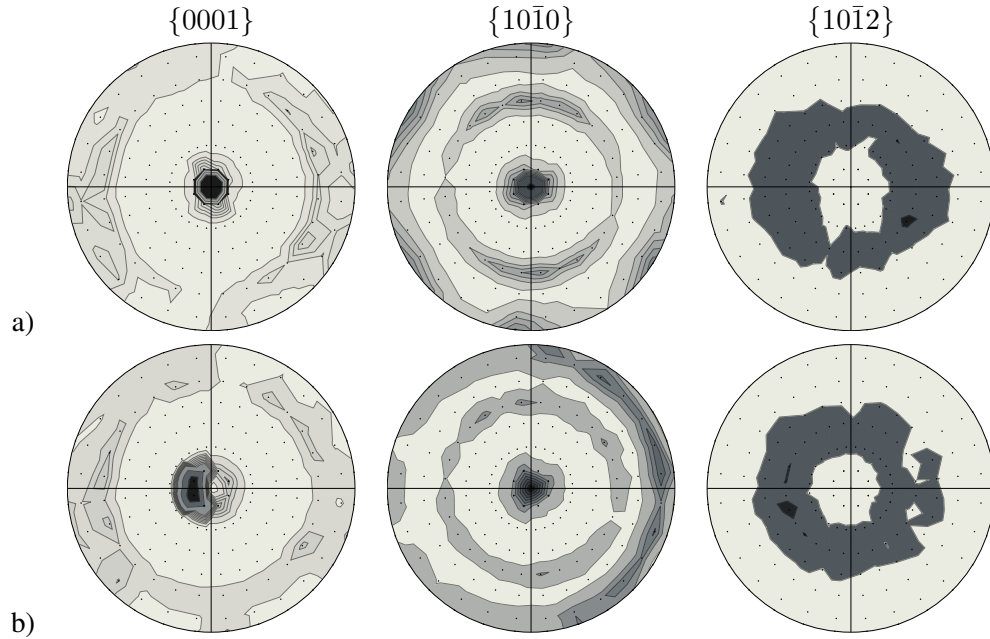
Rysunek 3.13 przedstawia zestawienie krzywych uzyskanych w symulacji modelem dwuskalowym dla zoptymalizowanych parametrów z wynikami doświadczeń. Za pomocą zoptymalizowanych parametrów udało się z dużą dokładnością odwzorować krzywą dla rozciągania (Rys. 3.13a). Dość dobrze udało się również odwzorować krzywą w przypadku ściskania. Kształt krzywej związanej z rozciąganiem ściskanej poprzednio próbki został odwzorowany najmniej dokładnie, co może być spowodowane nie uwzględnianiem umocnienia kinematycznego przez model.

Na Rys. 3.14 przedstawiono wykresy aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania uzyskane w symulacjach za pomocą zoptymalizowanych parametrów. Zgodnie z wnioskiem wyciągniętym z analizy figur biegunowych przedstawionych na Rys. 3.7b w czasie rozciągania dominujący udział w deformacji mają niebazalne systemy poślizgu: przyrządkowy i piramidalny <math>\langle c+a \rangle</math> II rzędu (por. Rys. 3.14a). Początkowo największą aktywność wykazuje poślizg bazalny. Efektywne napężenie styczne na bazalnych systemach poślizgu jest bardzo niskie z uwagi na silną wstępną teksturę bazalną. Z drugiej strony, napężenie krytyczne na bazalnych systemach poślizgu jest wielokrotnie niższe niż na systemach niebazalnych, co skutkuje uruchomieniem tych systemów dla kryształów nieznacznie odbiegających od idealnej orientacji, dla której kierunek osi „c” jest równoległy do normalnej do płaszczyzny blachy „ND”. Działanie systemów bazalnych powoduje dalszy obrót kryształów w kierunku orientacji idealnej, skutkujący jeszcze większym spadkiem efektywnych naprężeń na tych systemach. Powyższe, w połączeniu z umocnieniem działającym na tych systemach (wzrost  $CRSS_{\text{basal}}$ ) prowadzi do uruchomienia niebazalnych systemów poślizgu, które mają dominujący wpływ na powstałą po deformacji teksturę.

Rys. 3.14b przedstawia aktywności mechanizmów poślizgu i bliźniakowania uzyskane w symulacji ściskania i kolejnego rozciągania. W tym przypadku dużą rolę odgrywa bliźniakowanie, które



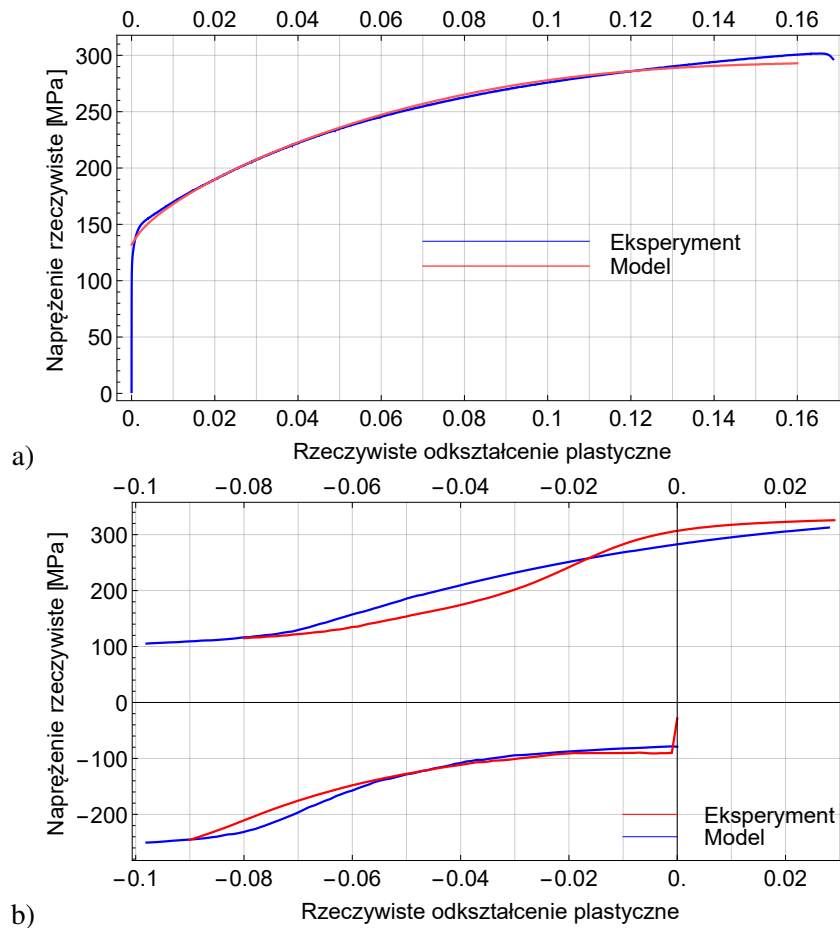
Rysunek 3.11: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  rzutowane na płaszczyznę przekroju poprzecznego próbki wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnie przyjętej i po symulacji; b) ściskania 2%, c) ściskania 4%, d) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% prostopadłe do kierunku ED i e) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% pod kątem  $45^\circ$  do kierunku ED dla zoptymalizowanych parametrów.



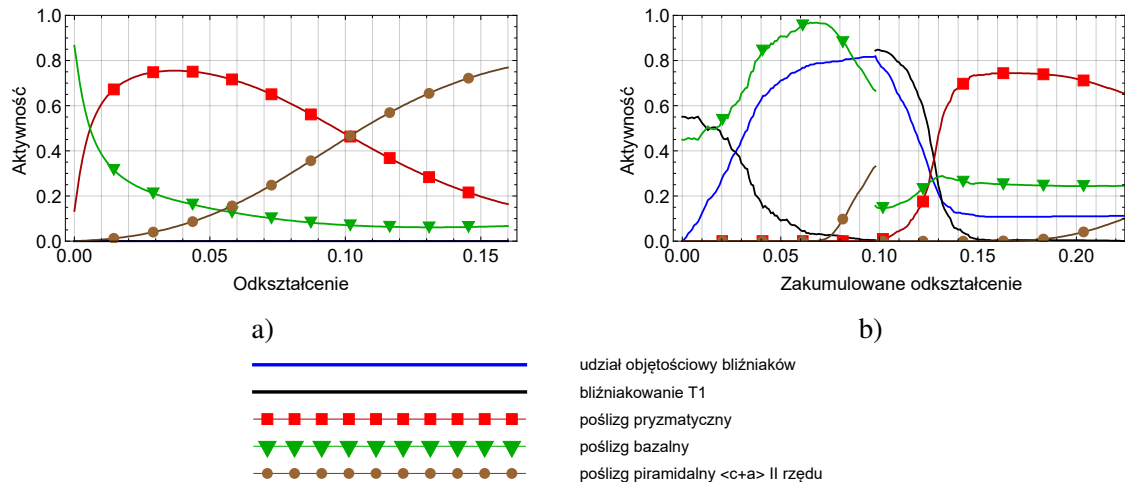
Rysunek 3.12: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  rzutowane na płaszczyznę przekroju poprzecznego początkowego pręta wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% prostopadłe do kierunku ED i b) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% pod kątem  $45^\circ$  do kierunku ED dla zoptymalizowanych parametrów.

Tablica 3.4: Parametry dwuskalowego modelu plastyczności kryształu wyznaczone dla stopu AZ31b w oparciu o wyniki uzyskane dla próbek wyciętych z walcowanej blachy. Mając na celu zwięzłość opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: prism. (pryzmatyczny), basal (bazalny), 2. pyr.  $\langle c+a \rangle$  (piramidalny  $\langle c+a \rangle$  drugiego rzędu) i slip (poślizg).

| System                       | Oddziaływanie | $\tau_{c0}$<br>[MPa] | $h_0$<br>[MPa] | $\beta$ | $\tau_{sat}/f_{sat}$<br>[MPa]/- | $\mu$<br>- | $q$    |               |                           |
|------------------------------|---------------|----------------------|----------------|---------|---------------------------------|------------|--------|---------------|---------------------------|
|                              |               |                      |                |         |                                 |            | prism. | basal<br>twin | pyr $\langle c+a \rangle$ |
| prism.                       | slip-slip     | 67,11                | 638,5          | 1,0     | 168,02                          | 0,77       | 1,4    | 1,4           | 1,4                       |
|                              | slip-twin     | —                    | 1,04           | —       | 0,75                            | —          |        | 1,19          |                           |
| basal                        | slip-slip     | 6,76                 | 115,78         | 1,0     | 103,15                          | 0,8        | 1,4    | 1,4           | 1,4                       |
|                              | slip-twin     | —                    | 1,14           | —       | 1,49                            | —          |        | 1,19          |                           |
| 2. pyr $\langle c+a \rangle$ | slip-slip     | 85,87                | 1303,56        | 1,0     | 117,22                          | 1,5        | 1,4    | 1,4           | 1,4                       |
|                              | slip-twin     | —                    | 1,02           | —       | 0,67                            | —          |        | 1,19          |                           |
| T1                           | twin-slip     | —                    | 44,25          | 1,0     | 0,0                             | —          | 1,19   | 1,19          | 1,19                      |
|                              | twin-twin     | 35,86                | 0,94           | —       | 0,87                            | 0,83       |        | 1,19          |                           |



Rysunek 3.13: Krzywe napężenie rzeczywiste – rzeczywiste odkształcenie plastyczne uzyskane w próbach eksperymentalnych i za pomocą zoptymalizowanych parametrów modelu dwuskalowego dla próbek wyciętych z walcowanej blachy AZ31b. Wyniki były uzyskane w próbach a) rozciągania i b) ściskania i kolejnego rozciągania. W przypadku b) opuszczono część krzywej eksperymentalnej, która nie była brana pod uwagę przy optymalizacji parametrów.



Rysunek 3.14: Aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowany udział objętościowy bliźniaków uzyskane w symulacjach rozciągania i ściskania próbek wyciętych z blachy AZ31b. a) Rozciąganie, b) ściskanie i rozciąganie.

prowadzi do reorientacji większości ziaren. Początkowo w zreorientowanych ziarnach zachodzi poślizg bazalny, ponieważ przy jego bardzo niskim CRSS może być on aktywowany dla orientacji o osiach „c” choć w niewielkim stopniu odchylonych od kierunku „RD”. Po zmianie kierunku odkształcenia (ok. 10% odkształcenia) następuje odbliźniaczenie.<sup>5</sup> Ziarna zostają ponownie zreorientowane i dalsza deformacja może zachodzić głównie przy udziale niebazalnych systemów poślizgu, analogicznie do symulacji próby rozciągania z Rys. 3.14a.

Rys. 3.15 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  uzyskane w symulacjach prób eksperymentalnych. Na rysunku 3.15a przedstawiono wstępnie przyjętą w symulacjach teksturę bazalną. Rys. 3.15b przedstawia figury biegunowe po rozciąganiu, Rys. 3.15c po ściskaniu, a Rys. 3.15d po rozciąganiu następującym po ściskaniu do 10%. W symulacji udało się dobrze odwzorować tekstury uzyskane w eksperymencie. Tekstura po rozciąganiu poprzedzonym ściskaniem (Rys. 3.15d) jest silniejsza niż tekstura po samym rozciąganiu (Rys. 3.15b). Taki rozwój tekstury wydaje się być konsekwencją dwukrotnej reorientacji sieci na skutek bliźniakowania i odbliźniaczania. Należy tu zauważyć, że w przypadku tekstury uzyskanej w eksperymencie tekstura po ściskaniu i kolejnym rozciąganiu (Rys. 3.7d) jest słabsza niż tekstura tylko po ściskaniu. Odwrotny efekt obserwowany w symulacji może być skutkiem nie uwzględnienia przez model dwuskalowy rozdrobnienia ziaren prowadzącego do osłabienia („rozmycia”) tekstury, lub być również rezultatem aktywności innego mechanizmu, który nie został wzięty pod uwagę w modelu.

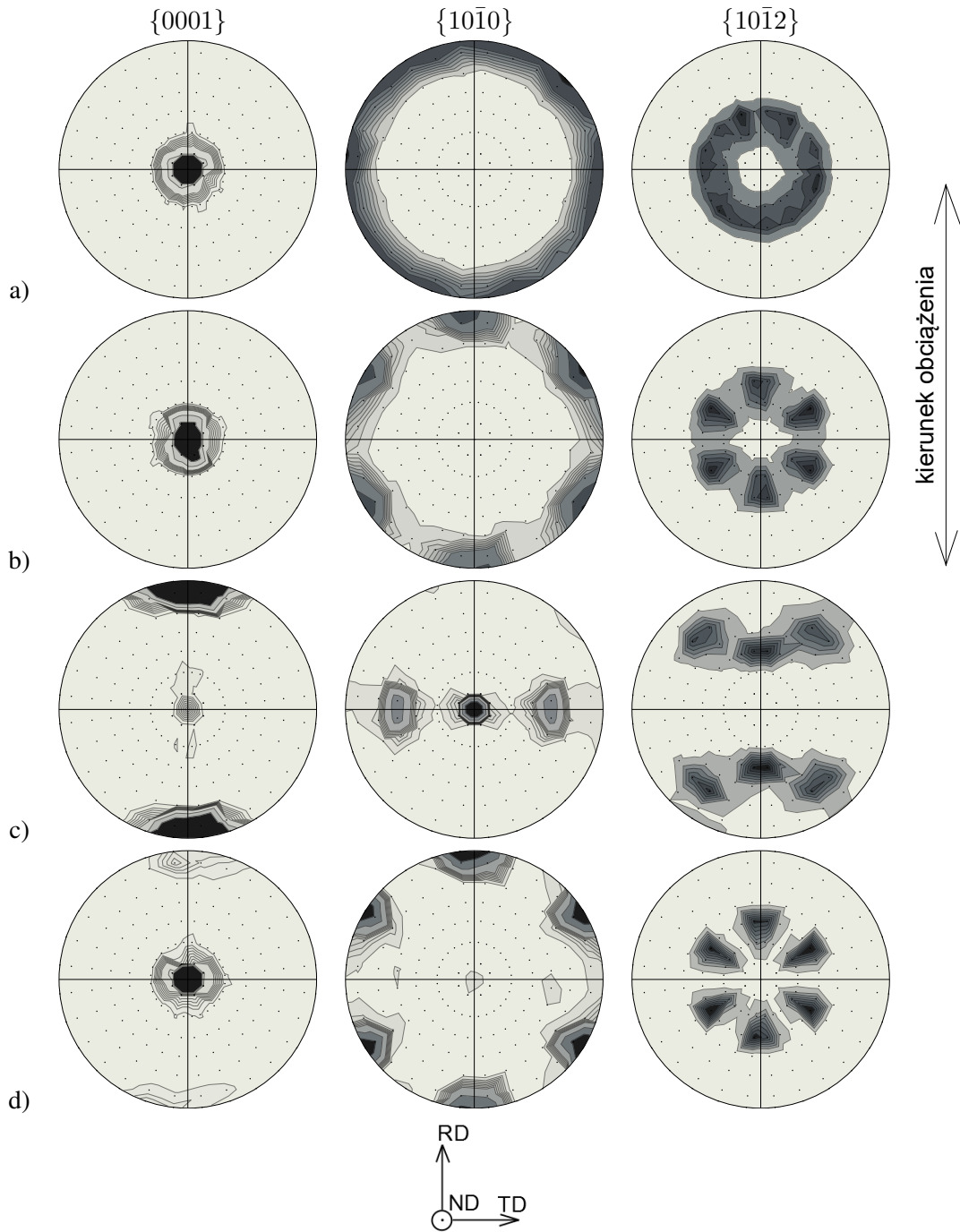
### 3.3 Symulacje rozwoju tekstury

#### 3.3.1 Czysty tytan - ECAP

##### *Eksperyment*

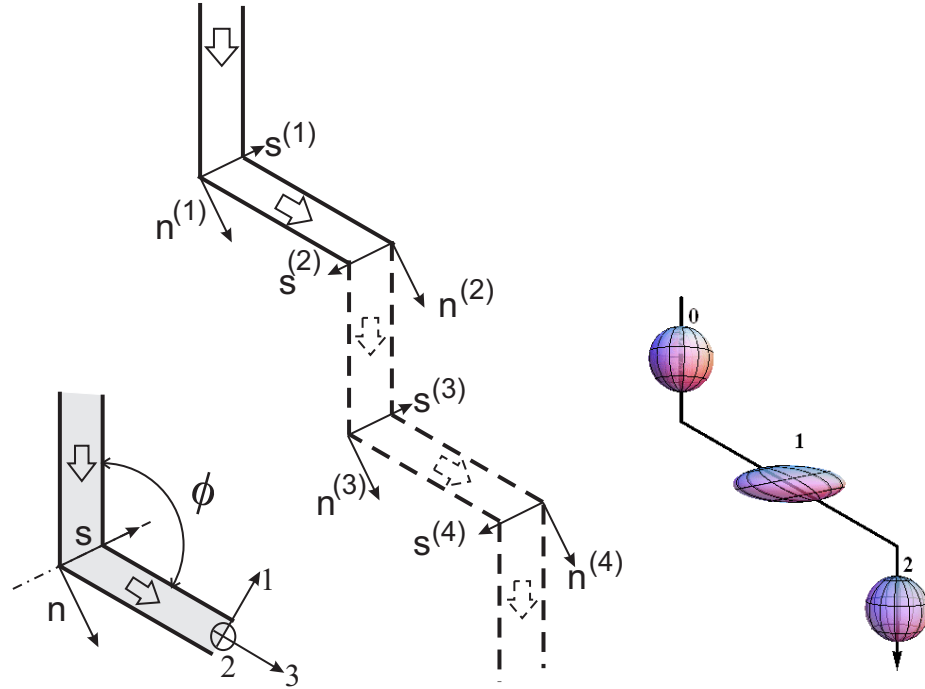
Wykonano symulację procesu ECAP dla czystego tytanu przy pomocy dobranych wcześniej parametrów. Następnie wyniki symulacji porównano z wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi

<sup>5</sup>Odbliźniaczenie jest tu rozumiane jako powrót orientacji kryształu do stanu przed bliźniakowaniem, nie jest więc rozważane, czy odwróceniu ulega również ścinanie powodowane bliźniakowaniem, jak ma to miejsce w przypadku metody macierzy korespondencji, por. (Szczerba et al., 2016).



Rysunek 3.15: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnie przyjętej do symulacji, b) po rozciąganiu, c) po ścisnaniu i d) po rozciąganiu następującym po ścisnaniu.





Rysunek 3.16: Schemat symulacji procesu ECAP z zaznaczeniem deformującej się kuli (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015).

przez zespół profesora Sztwiertni (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015). Eksperyment przeprowadzono dla ścieżki C (obrót wzdłuż osi próbki o  $180^\circ$  po każdym przejściu, por. Rys. 1.2) dla kąta kanału  $\phi = 120^\circ$  (por. Rys. 3.16) w temperaturze  $300^\circ\text{C}$ . Badano mikrostrukturę materiału po 4 i 8 przejściach przez kanał.

### Modelowanie

Proces ECAP może być modelowany jako proste ścinanie, Rys. 1.8 (Segal, 1995, 1999). Ścinanie jest zadane przez wektor  $\mathbf{n}$  normalny do płaszczyzny ścinania i wektor  $\mathbf{s}$  leżący w tej płaszczyźnie. Wektor  $\mathbf{s}$  wyznacza kierunek ścinania. Gradient deformacji  $\mathbf{F}$  po pojedynczym przejściu przez kanał oraz odpowiadający mu gradient prędkości mają następującą formę:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + 2 \operatorname{ctg}(\phi/2) \mathbf{s} \otimes \mathbf{n}, \quad \mathbf{L} = \dot{\gamma} \mathbf{s} \otimes \mathbf{n}, \quad (3.29)$$

gdzie  $\dot{\gamma}$  oznacza prędkość deformacji. Zwykle wykonuje się wielokrotne przeciskanie próbki przez kanał, a próbka między przejściami jest obracana w różny sposób w zależności od ścieżki procesu, co zostało opisane w rozdziale pierwszym. W modelowaniu zamiast obracać próbkę użyto ciągłego kanału prowadzącego do takiej samej deformacji, por. Rys. 3.16. Dzięki temu zmniejszony został koszt obliczeniowy. Dla każdego przejścia  $k$ , płaszczyzna i kierunek ścinania były obracane względem orientacji w pierwszym przejściu przy użyciu odpowiedniego tensora obrotu  $\mathbf{R}^{(k)}$ :

$$\mathbf{n}^{(k)} = \mathbf{R}^{(k)} \mathbf{n}^{(1)}, \quad \mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{R}^{(k)} \mathbf{s}^{(1)}. \quad (3.30)$$

W przypadku symulacji ścieżki C równania te przybierają postać:

$$\mathbf{n}^{(k)} = \mathbf{n}^{(1)}, \quad \begin{cases} \mathbf{s}^{(2i-1)} = \mathbf{s}^{(1)} \\ \mathbf{s}^{(2i)} = -\mathbf{s}^{(1)} \end{cases} \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (3.31)$$

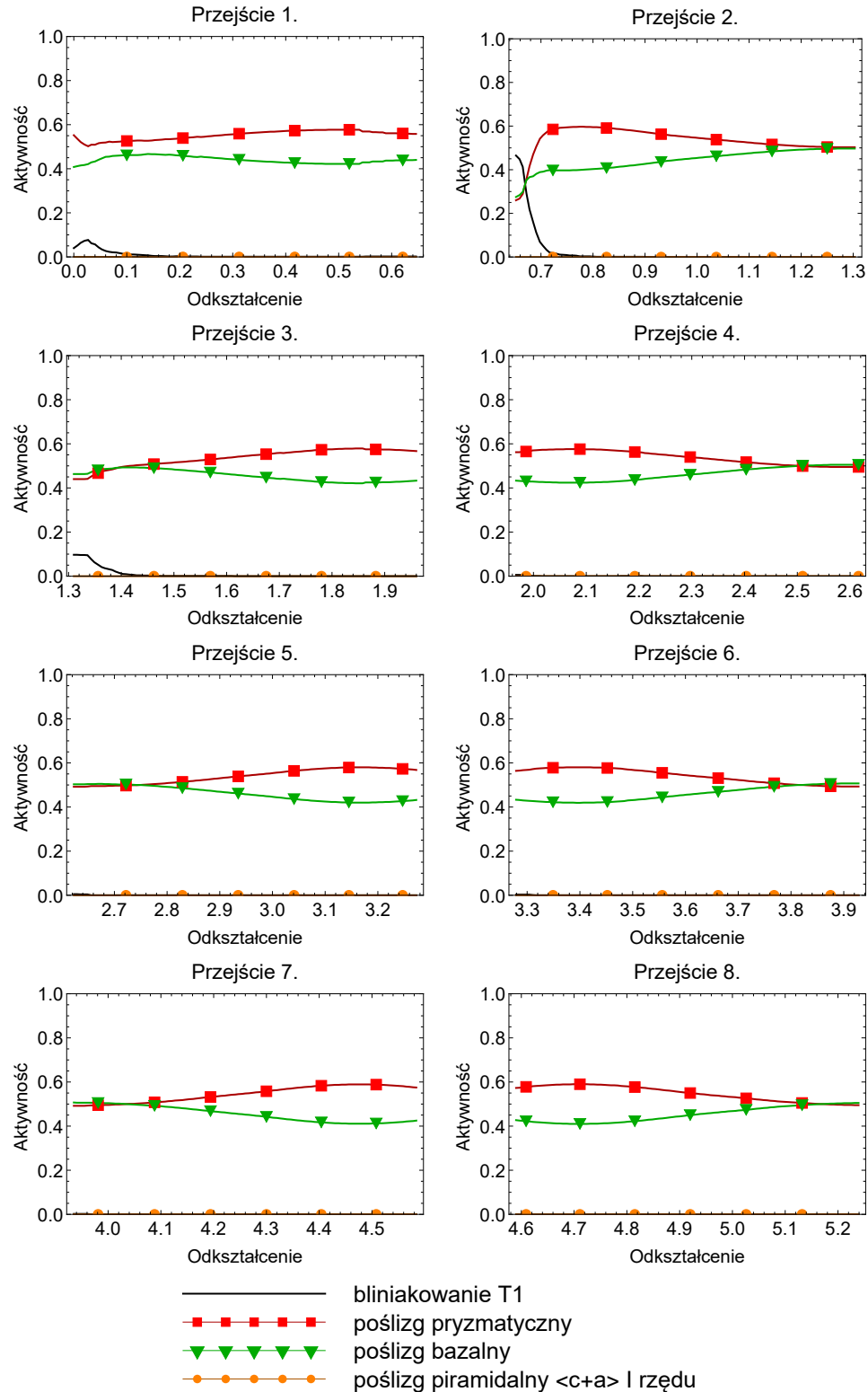
Na rysunku 3.16 pokazano także zmianę kształtu początkowo kulistego elementu objętości. W przypadku modelowania ścieżki C przez proste ścinanie element objętości wraca do swojego pierwotnego kształtu po parzystych przejściach przez kanał. Sytuacja ta może ulec zmianie w przypadku uwzględnienia bardziej złożonego modelu deformacji w procesie, np. poprzez wykorzystanie wyników symulacji wykonanej za pomocą MES.

#### *Wyniki modelowania i porównanie z eksperymentem*

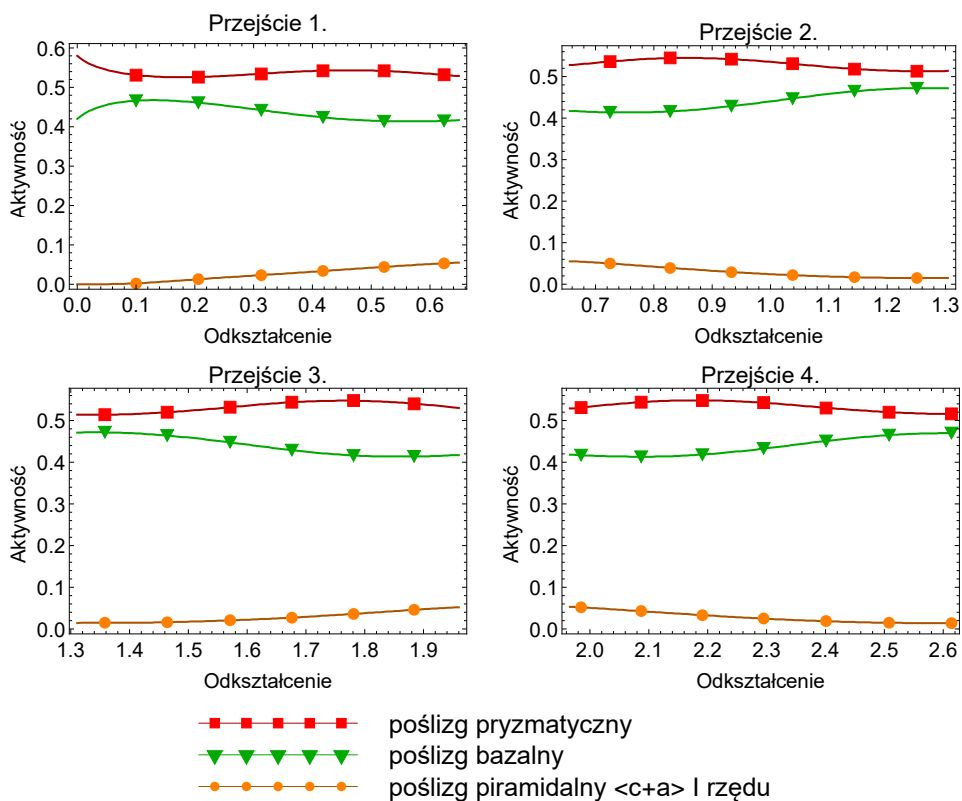
Wykonano symulację ośmiu przejść przez kanał kątowy o  $\phi = 120^\circ$  w ścieżce C dla parametrów ustalonych w sekcji 2.2. Ponadto, aby ocenić wpływ bliźniakowania na rozwój tekstury wykonano również analogiczną symulację dla parametrów bez bliźniakowania (ustalonych w celu modelowania procesu KOBO). Reprezentatywny agregat polikrystaliczny składał się z 500 losowo wybranych orientacji ziaren. Do obliczeń użyty został wariant styczny (ang. tangent) modelu VPSC.

Względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania zostały pokazane na rysunku 3.17. Jak widać, najbardziej aktywne są systemy poślizgu na płaszczyznach pryzmatycznych i bazalnych. Bliźniakowanie również wykazuje pewną aktywność, szczególnie na początku deformacji. System piramidalny nie został aktywowany w żadnym z przejść. Podczas pierwszego przejścia najbardziej aktywny jest system pryzmatyczny. System bazalny również wykazuje istotną aktywność. Poniżej odkształcenia 0,1 występuje także niewielka aktywność bliźniakowania. Podczas drugiego przejścia w pierwszych przyrostach odkształcenia bliźniakowanie wykazało największą ze wszystkich modów aktywność, jednak szybko ustąpiło miejsca systemom poślizgu. W kolejnym przejściu bliźniakowanie nie odgrywało już znaczącej roli. W modelu przyjęto nasycenie bliźniakowania po osiągnięciu udziału objętościowego fazy bliźniaczej równego 0,3. W związku z tym po osiągnięciu wartości nasycenia bliźniakowanie przestało być aktywne, co widać dla wyników w przejściu 4. i kolejnych. W przypadku modelowania ścieżki C za pomocą prostego ścinania deformacja elementu objętości w każdym parzystym przejściu jest odwróceniem deformacji w przejściu nieparzystym. Ponieważ bliźniakowanie, w odróżnieniu od poślizgu może zachodzić w jedną stronę, to dopóki jest ono aktywne mechanizmy deformacji w przejściu parzystym działają w inny sposób niż w przejściu nieparzystym. Po zaprzestaniu działania bliźniakowania wykresy aktywności poślizgu i bliźniakowania po przejściach parzystych i nieparzystych stają się swoimi odbiciami lustrzanymi. Dla porównania Rys. 3.18 przedstawia wykresy aktywności systemów poślizgu dla parametrów bez bliźniakowania. Wykresy aktywności w parzystych i nieparzystych przejściach są symetryczne praktycznie od początku. W pierwszych dwóch przejściach nie ma jeszcze pełnej symetrii z uwagi na postępujące umocnienie. W dalszych przejściach, gdy umocnienie przestało już działać wykresy stają się jeszcze bardziej symetryczne. Podsumowując, można stwierdzić, że w przyjętym sposobie modelowania w ścieżce C deformacja w każdym przejściu zachodzi w odwrotną stronę niż w przejściu poprzednim nie tylko na poziomie całego agregatu, ale także na poziomie pojedynczego ziarna, chyba, że uwzględniany jest wpływ bliźniakowania. Bliźniakowanie, jako system deformacji zachodzący tylko w jedną stronę, zmienia charakter deformacji.

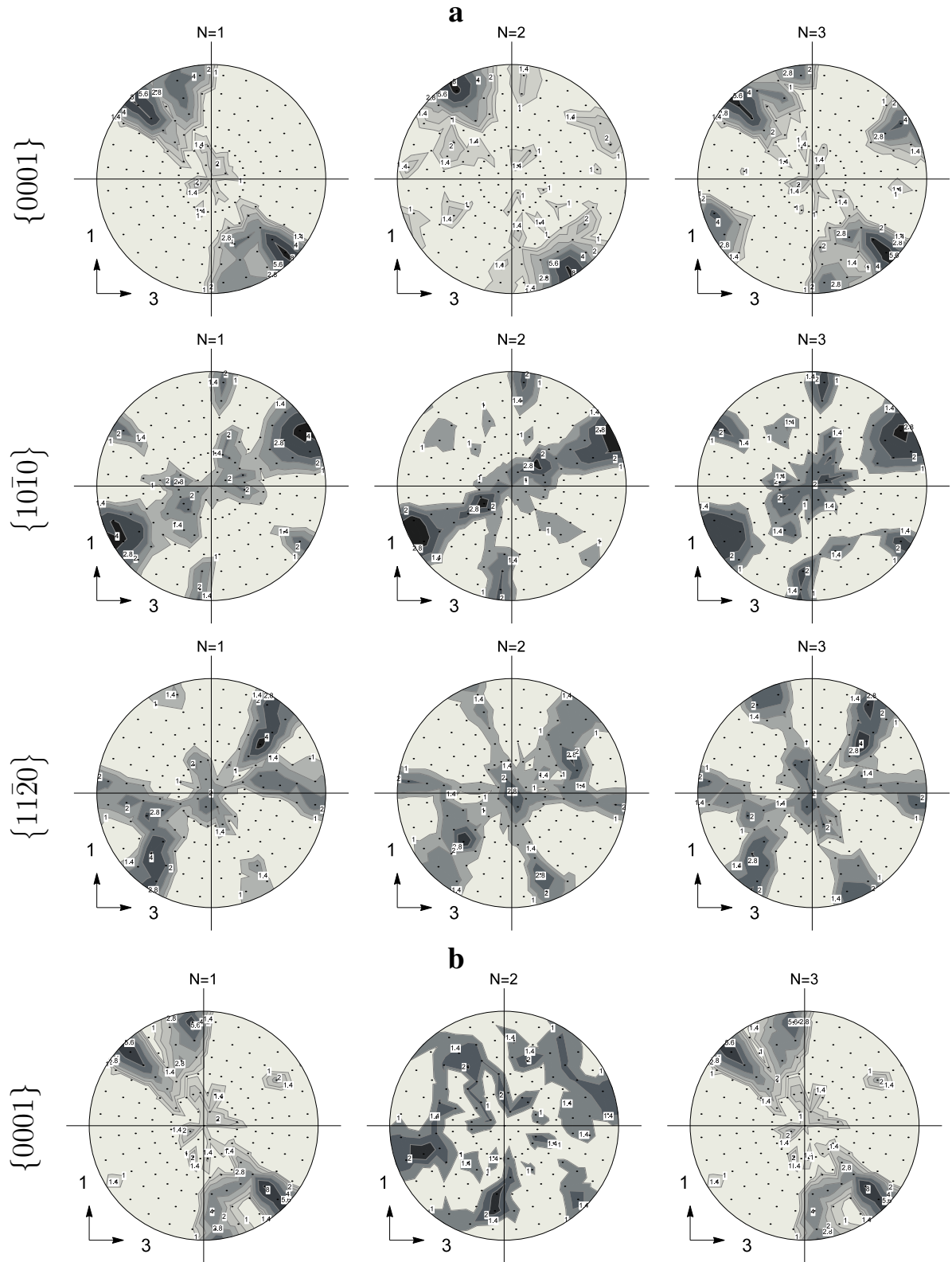
Tekstury uzyskane dla pierwszych trzech przejść przez kanał przedstawia rysunek 3.19a. Dla porównania, Rys. 3.19b przedstawia wyniki uzyskane w symulacji bez bliźniakowania (parametry dobrane dla procesu KOBO). Jak widać, w symulacji bez bliźniakowania tekstura po drugim przejściu wraca do tekstury wstępnej (przyjętej jako losowa). Powrót tekstury po drugim przejściu przez kanał w ścieżce C do stanu przed procesem dla materiału bez bliźniakowania był również przewidywany



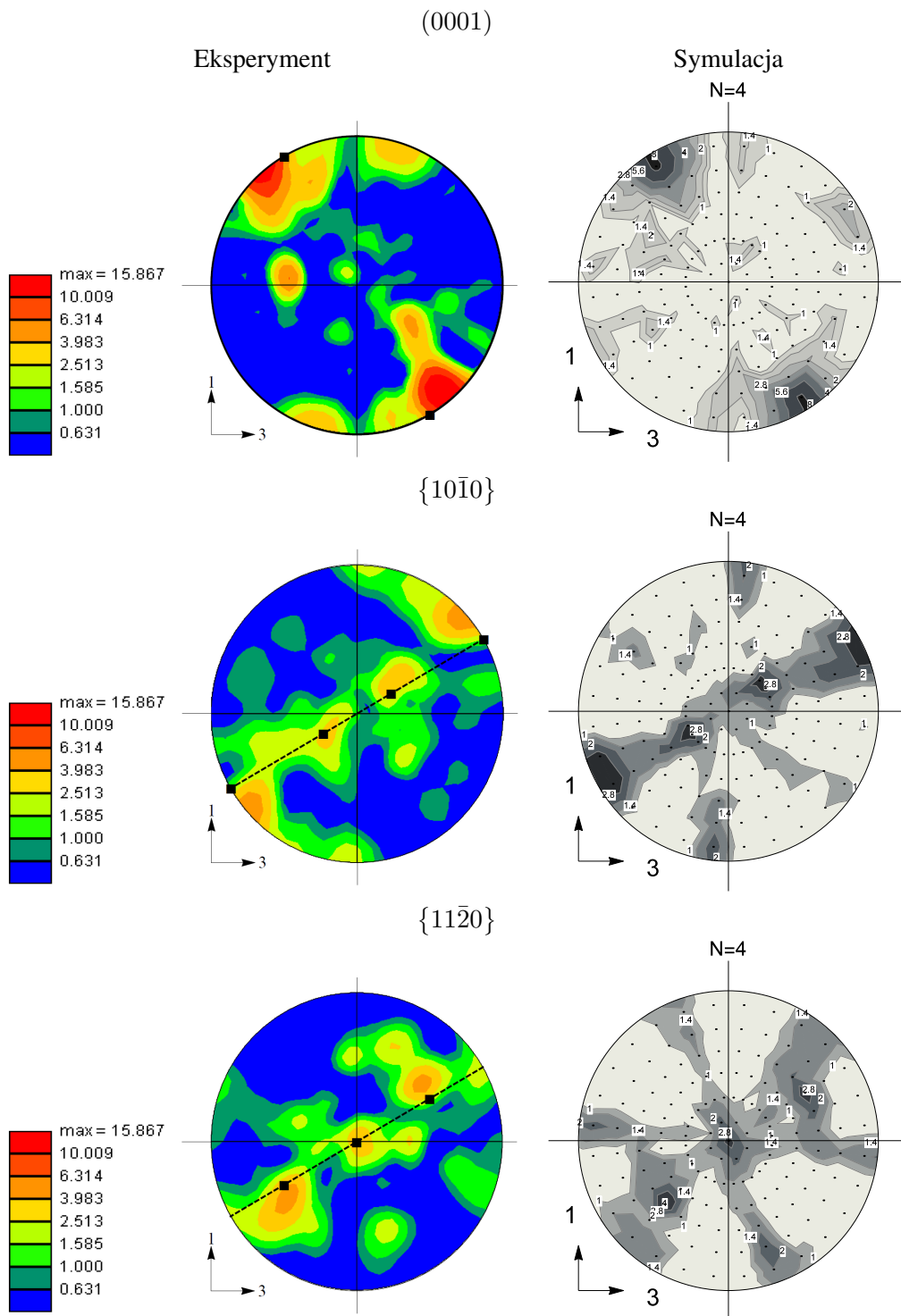
Rysunek 3.17: Względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania w a) pierwszym, b) drugim, c) trzecim, d) czwartym, e) piątym, f) szóstym, g) siódmym i h) ósmym przejściu przez kanał kątowy w procesie ECAP.



Rysunek 3.18: Względne aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania w a) pierwszym, b) drugim, c) trzecim i d) czwartym przejściu przez kanał kątowy w procesie ECAP dla parametrów bez bliźniakowania (dobranych dla symulacji procesu KOBO).



Rysunek 3.19: (a) Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  przedstawiające teksturę uzyskaną w symulacjach pierwszych trzech przejść przez kanał ECAP  $\phi = 120^\circ$  w ścieżce C. (b) Figury biegunowe  $\{0001\}$  uzyskane w symulacji bez bliźniakowania (parametry dobrane dla procesu KOB0).



Rysunek 3.20: Figury biegunowe (0001),  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  przedstawiające teksturę uzyskaną w eksperymencie (lewą kolumnę) i symulacji (prawy kolumnę) po czterech przejściach przez kanał ECAP  $\phi = 120^\circ$  w ścieżce C.

przez Beyerlein i Tótha (2009), którzy używali podobnego sposobu modelowania. Sytuacja zmienia się, gdy w modelu zostaje uwzględnione bliźniakowanie. Tekstura po przejściu parzystym zaczyna wówczas przypominać teksturę po przejściu nieparzystym. Rozwój tekstury w symulacji jest odzwierciedleniem działających systemów poślizgu i bliźniakowania, które omówiono w poprzednim akapicie. Gdy działają tylko poślizgi deformacja na poziomie kryształu w parzystym przejściu działa w odwrotnym kierunku niż deformacja w przejściu poprzednim. Prowadzi to do powrotu tekstury do stanu przed procesem. Działanie bliźniakowania (nawet krótkotrwałe), które jest modem z natury niesymetrycznym powoduje, że deformacja w parzystym przejściu na poziomie ziarna nie jest odwróceniem deformacji w przejściu poprzednim.

Na rysunku 3.20 zamieszczono figury biegunowe przedstawiające teksturę materiału po 4. przejściu przez kanał uzyskane w eksperymencie i symulacji modelem dwuskalowym VPSC. Uzyskano dość dobrą zgodność otrzymanych wyników symulacji z danymi eksperymentalnymi. W szczególności udało się poprawnie przewidzieć nachylenie płaszczyzny  $\{0001\}$  o kąt  $30^\circ$  do osi „1”, jak również położenie odpowiednio czterech i trzech maksimum na figurach biegunowych  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$ .

### 3.3.2 Czysty tytan - KOBO

#### *Eksperyment*

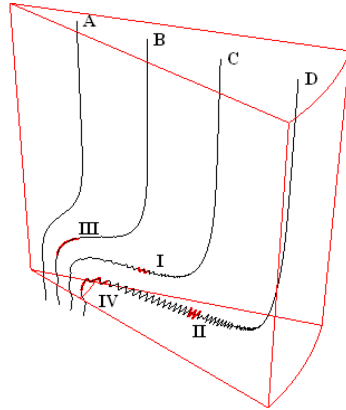
Badania eksperymentalne dla procesu KOBO zostały wykonane przez zespół profesora Sztwiertni z Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015). Wstępny materiał stanowiły walcowane na gorąco pręty o średnicy 35 mm wykonane z czystego tytanu. W tak przygotowanym materiale występowała jednorodna mikrostruktura składająca się z równoosiowych ziaren o średnim wymiarze  $31\mu\text{m}$  i odchyleniu standardowym  $17\mu\text{m}$ . Tekstura wstępnego materiału była podobna do tekstury próbek użytych w procesie ECAP: ok. połowa normalnych do płaszczyzn  $\{0001\}$  była skierowana prostopadle do osi pręta, natomiast pozostałe kryształy były zorientowane w sposób losowy. Pręt bezpośrednio przed procesem był podgrzany do temperatury  $450^\circ\text{C}$ , a sam proces był wykonywany w temperaturze ok.  $400^\circ\text{C}$ . Średnica pręta po wyciskaniu wynosiła 8 mm. Prędkość wyciskania wynosiła 0,5 mm/s, kąt oscylacji matrycy  $\pm 6^\circ$  a częstotliwość obrotu 5 Hz. Tekstura był mierzona za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD – ang. X-ray diffraction) oraz metodą dyfrakcji elektronów wstecznie rozproszonych (EBSD – ang. electron backscatter diffraction). Opis procedury eksperymentalnej można znaleźć w pracy (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015).

#### *Symulacje*

Deformacja w procesie KOBO jest znacznie bardziej skomplikowana niż w procesie ECAP i nie może być wyznaczona za pomocą stałego gradientu prędkości deformacji. Z tego powodu, Petryk i Stupkiewicz (2014) opracowali procedurę do wyznaczania trajektorii gradientu deformacji za pomocą analizy MES dla sztywno-lepkoplastycznego modelu Nortona-Hoffa bez umocnienia. Procedura ta została użyta do wyznaczenia trajektorii użytych do modelowania rozwoju tekstury polikryształu w procesie KOBO.

Według modelu Nortona-Hoffa, część dewiatorowa  $\mathbf{S}$  naprężenia Cauchy’ego  $\boldsymbol{\sigma}$  jest związana z tensorem prędkości deformacji Eulera  $\mathbf{D}$  ( $\text{tr } \mathbf{D} = 0$ ) przez związek:

$$\mathbf{S} = \frac{2}{3} \frac{\sigma_y}{D_{\text{II}}^0} \left( \frac{d_{\text{II}}}{d_{\text{II}}^0} \right)^{m-1} \mathbf{D}, \quad D_{\text{II}} = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{D} \cdot \mathbf{D}}, \quad (3.32)$$



Rysunek 3.21: Trajektorie deformacji dla czterech punktów materialnych policzone w analizie MES dla współczynnika  $m = 0,02$  i parametrów procesu  $\phi_0 = \pm 6^\circ$ ,  $d_o : d = 35 : 8$  [mm],  $f = 5$  [Hz],  $V_0 = 0.5$  [mm/s].

gdzie  $\sigma_y$  jest referencyjnym naprężeniem płynięcia,  $D_{II}^0$  jest referencyjną prędkością odkształcenia a  $m \in (0, 1)$  jest współczynnikiem wrażliwości na prędkość odkształcenia. Użycie uproszczonego modelu bez umocnienia było umotywowane obserwowanym wysyceniem umocnienia materiału dla bardzo dużych zakumulowanych odkształceń plastycznych.

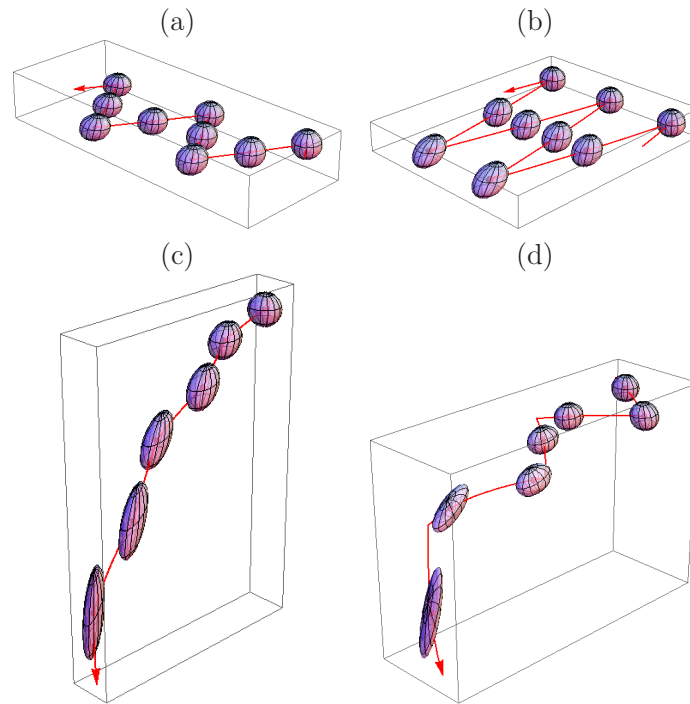
Powyższy model jest niezależny od historii odkształcenia, dlatego możliwe jest użycie MES w sformułowaniu Eulera. Pozwala to na rozwiązanie problemu brzegowego związanego z procesem SPD w efektywny sposób, w szczególności w przypadku kinematyki w stanie ustalonym. Ścieżki odkształcenia dla wybranych punktów materialnych mogą być następnie wyznaczone w procedurze obróbki wyników uzyskanych z pojedynczego rozwiązania. Obliczenia MES zostały wykonane za pomocą pakietu *AceGen/AceFEM* (Korelc, 2009). Więcej szczegółów można znaleźć w pracy (Petryk i Stupkiewicz, 2014).

Rys. 3.21 przedstawia trajektorie deformacji dla czterech punktów materialnych policzone w analizie MES dla współczynnika  $m = 0,02$  i parametrów procesu  $\phi_0 = \pm 6^\circ$ ,  $d_o : d = 35 : 8$  [mm],  $f = 5$  [Hz],  $V_0 = 0.5$  [mm/s], a Rys. 3.22 deformacje elementu objętości odpowiadające segmentom I-IV zaznaczonym na Rys. 3.21. Jak można zauważyć, im dalej od środka pręta, tym większe stają się oscylacje ścieżki deformacji, a co za tym idzie, tym większej zakumulowanej deformacji na skutek ścinania ulega elementarny element objętości.

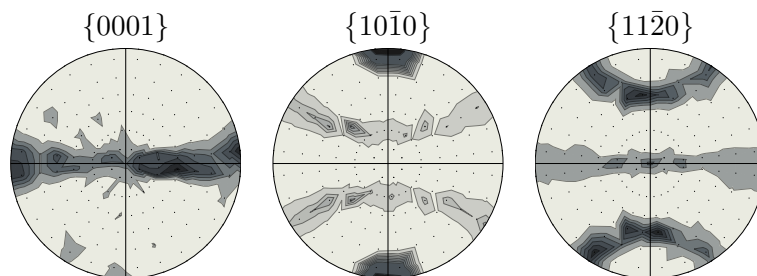
Gradyenty prędkości deformacji uzyskane na podstawie ścieżek policzonych w opisany powyżej sposób zostały użyte do policzenia rozwoju tekstury za pomocą modelu dwuskalowego. Rys. 3.23 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  dla wstępnie przyjętej tekstury, której zadaniem było odwzorowanie tekstury materiału użytego w eksperymencie.

Aktywności systemów uzyskane w symulacji procesu KOBO przedstawia Rys. 3.24a-e. Rys. 3.24f przedstawia aktywności systemów uzyskane w symulacji konwencjonalnego wyciskania. Jak widać, w modelowaniu deformacja materiału w osi wyciskanego pręta (por. Rys. 3.24a) prawie nie różni się od deformacji w modelu konwencjonalnego wyciskania. Większa część deformacji zachodzi przez poślizg na systemach pryzmatycznych, dla których początkowe CRSS ( $\tau_{c0}$ ) jest najniższe (por. 3.2). W miarę oddalania się od osi próbki coraz większe stają się oscylacje ścieżki deformacji (por. Rys. 3.21), którym towarzyszy ścinanie materiału. Oscylacje ścieżki deformacji powodują oscylacje aktywności systemów poślizgu, a ponadto wzrost aktywności systemów bazalnych kosztem aktywności systemów pryzmatycznych.

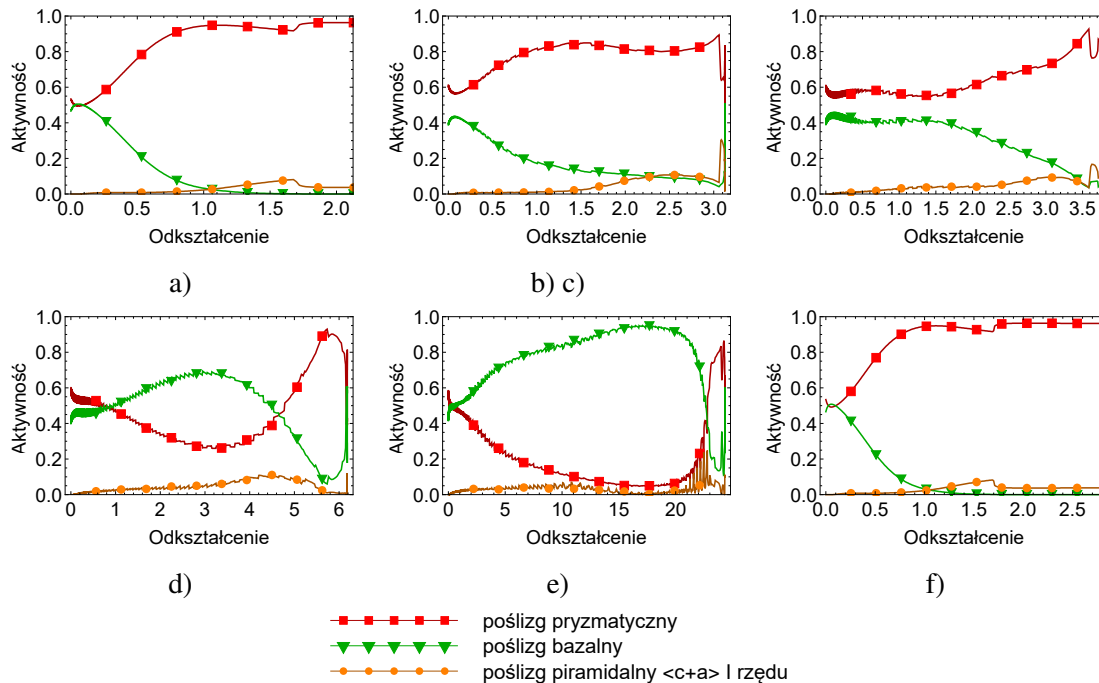




Rysunek 3.22: Deformacje elementu objętości w procesie KOB na segmentach trajektorii odkształcenia zaznaczonych na Rys. 3.21: (a) I, (b) II, (c) III, (d) IV.



Rysunek 3.23: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  dla wstępnie przyjętej tekstury użytej w symulacjach rozwoju tekstury w procesie KOB rzutowane na płaszczyznę przekroju podłużnego pręta.



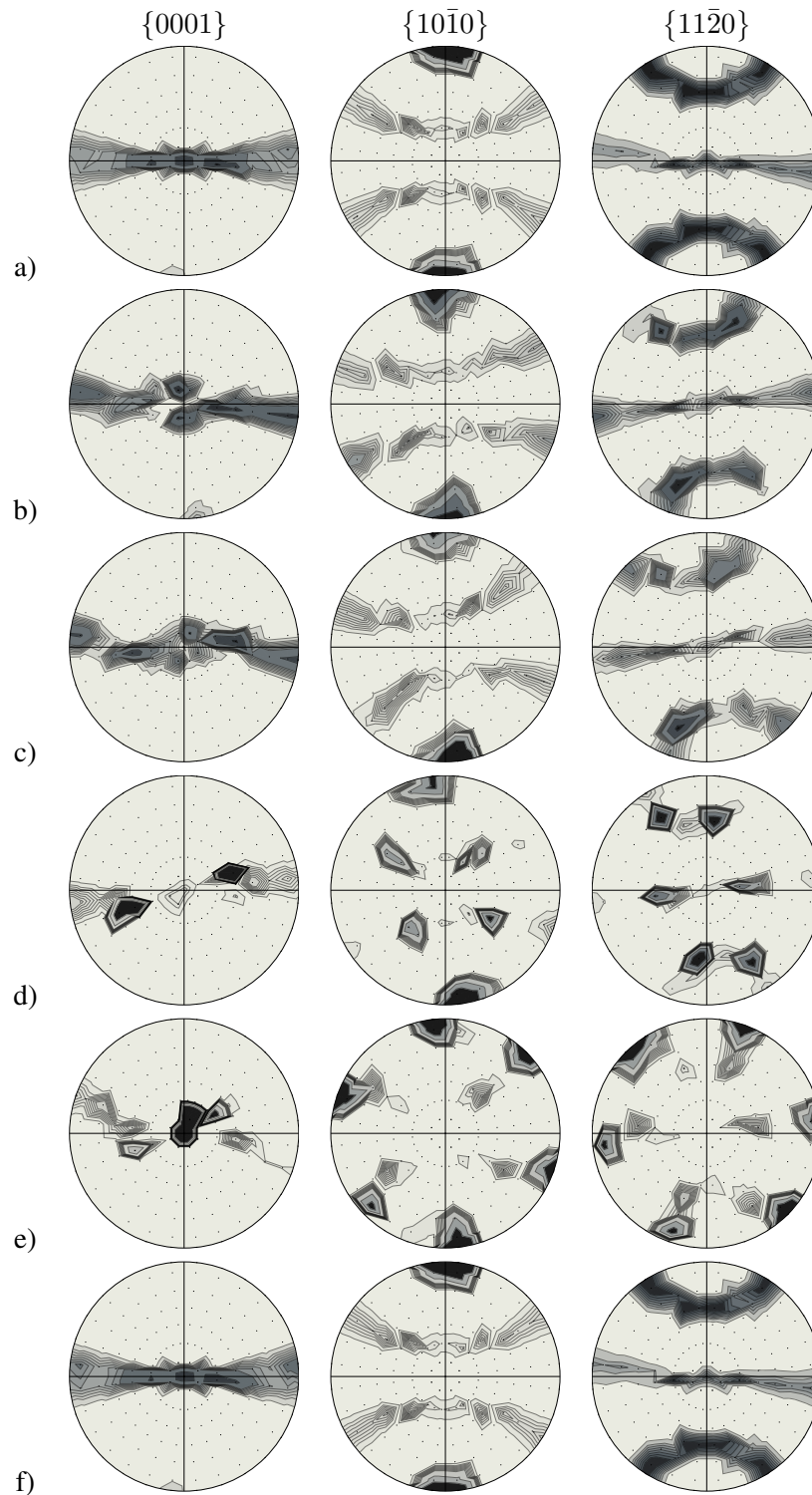
Rysunek 3.24: Aktywności systemów poślizgu uzyskane w symulacji procesu KOBO dla punktów materialnych o początkowych promieniach  $r_0 =$  a) 0, b) 4, c) 8, d) 12, e) 16 mm. Dla porównania, f) przedstawia aktywności uzyskane w symulacji procesu konwencjonalnego wyciskania.

Rys. 3.25 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  uzyskane w symulacji procesu KOBO dla punktów materialnych o początkowych promieniach  $r =$  a) 0, b) 4, c) 8, d) 12, e) 16 mm. Tekstury dla różnych wartości promienia znacznie się od siebie różnią, co jest konsekwencją innych ścieżek deformacji i innych aktywności różnych systemów poślizgu. Dla porównania pokazana została również tekstura uzyskana w symulacji wyciskania konwencjonalnego, Rys. 3.25f. Nie różni się ona zbyt wiele od tekstury dla promienia  $r = 0$ .

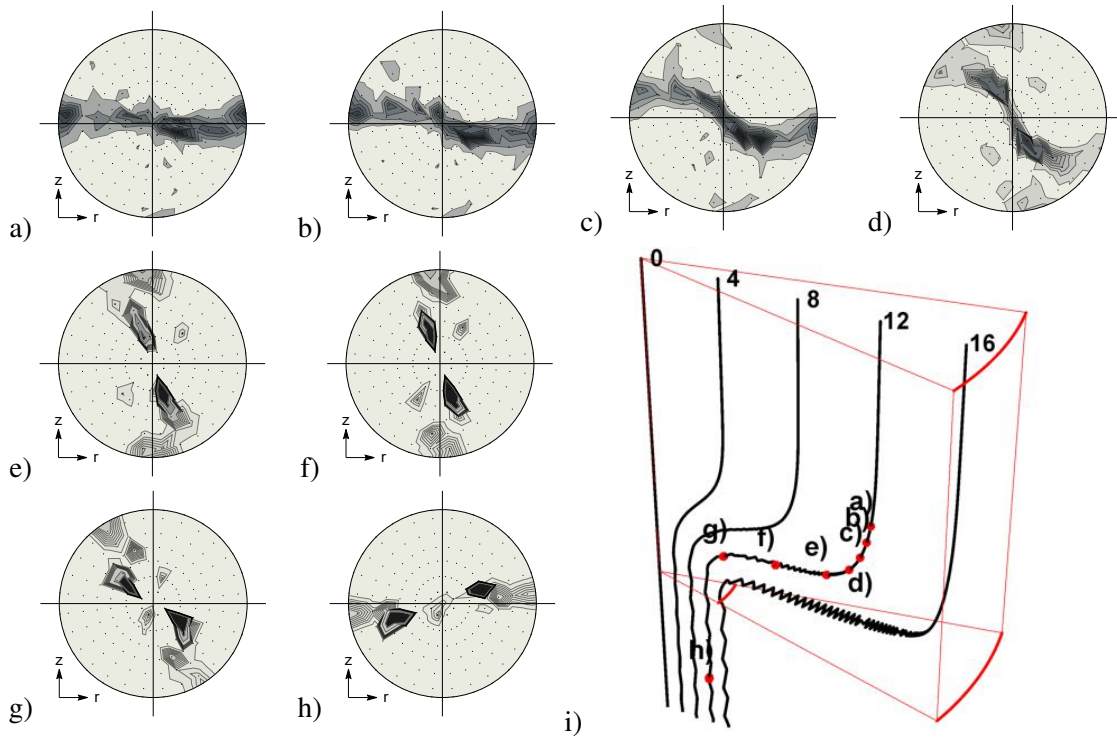
W celu dokładniejszej analizy rozwoju tekstury w zewnętrznej części pręta wyciskanego w procesie KOBO wykonano figury biegunowe tekstury uzyskanej w symulacji dla różnych punktów na ścieżce deformacji. Na rysunkach 3.26 i 3.27 zamieszczono figury biegunowe  $\{0001\}$  wykonane dla uzyskanej w symulacjach tekstury dla różnych punktów na ścieżkach deformacji dla promienia początkowego odpowiednio  $r = 12$  i 16 mm. Jak widać, początkowo (por. Rys. 3.26a i Rys.3.27a) tekstura przypomina teksturę uzyskiwaną dla procesu konwencjonalnego wyciskania. Dopiero później, gdy ścieżka zaczyna „zakręcać” oraz podlegać oscylacjom tekstura ulega obrotowi oraz staje się silniejsza na skutek działania systemów poślizgu. Na rysunku 3.28 przedstawiono zestawienie wyników symulacji z wynikami eksperymentu. Udało się uzyskać dość dobrą zgodność figur przewidzianych przez model z wynikami eksperymentu.

### 3.3.3 Stop magnezu AZ31b – ECAP

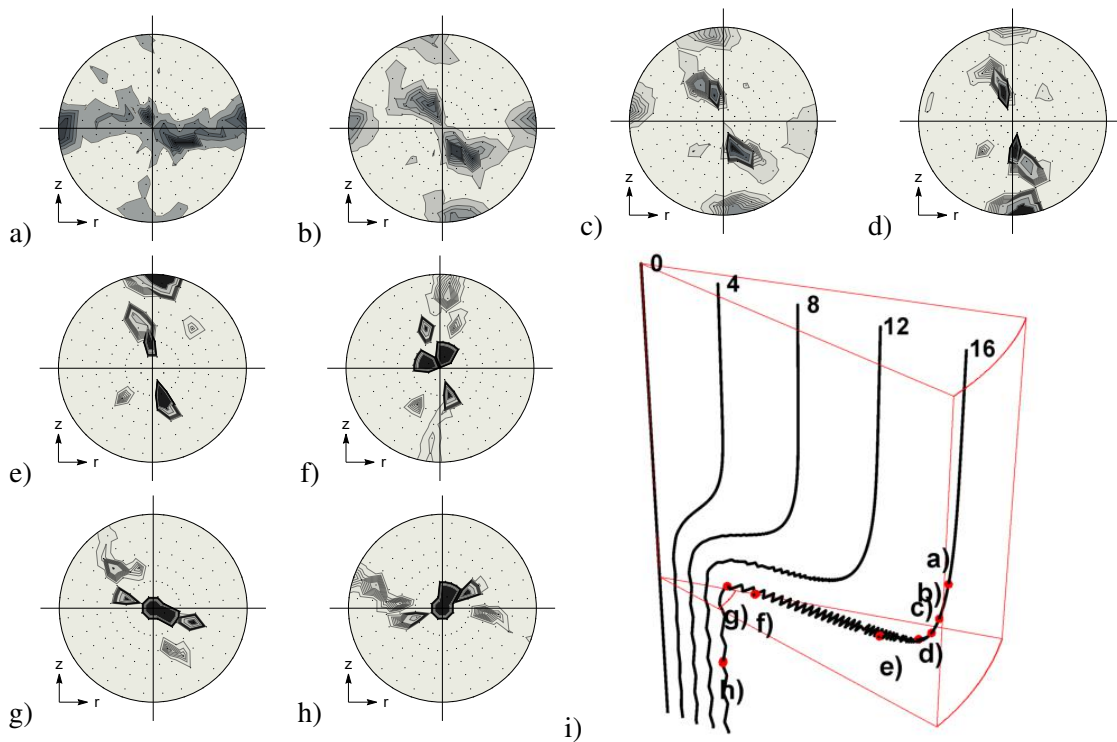
Przy wykorzystaniu mikromechanicznego modelu dwuskalowego wykonano również symulację jednego przejścia przez kanał w procesie ECAP dla stopu magnezu AZ31b. Wyniki symulacji były następnie porównane z dostępnymi w literaturze wynikami doświadczenia (Gu et al., 2013). Eksperyment był przeprowadzony w temperaturze pokojowej. Użyto 5 blach ustawionych obok siebie.



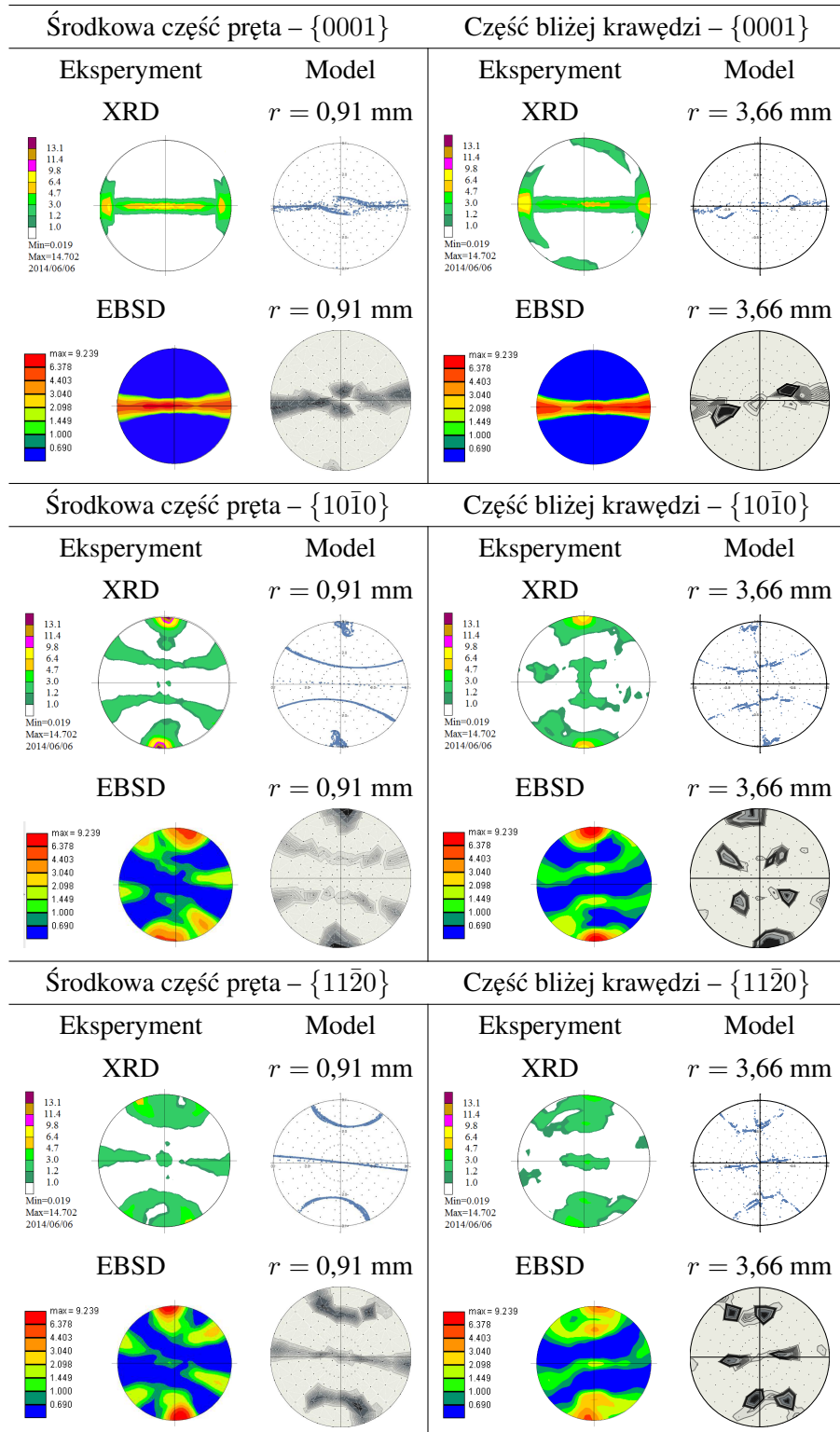
Rysunek 3.25: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  dla tekstury uzyskanej w symulacji procesu KOBO dla promienia  $r_0 =$  a) 0, b) 4, c) 8, d) 12, e) 16 mm oraz f) dla tekstury uzyskanej w symulacji konwencjonalnego wyciskania. Figury rzutowane na płaszczyznę przekroju podłużnego próbki, kierunek promieniowy jest równoległy do poziomej płaszczyzny rysunku.



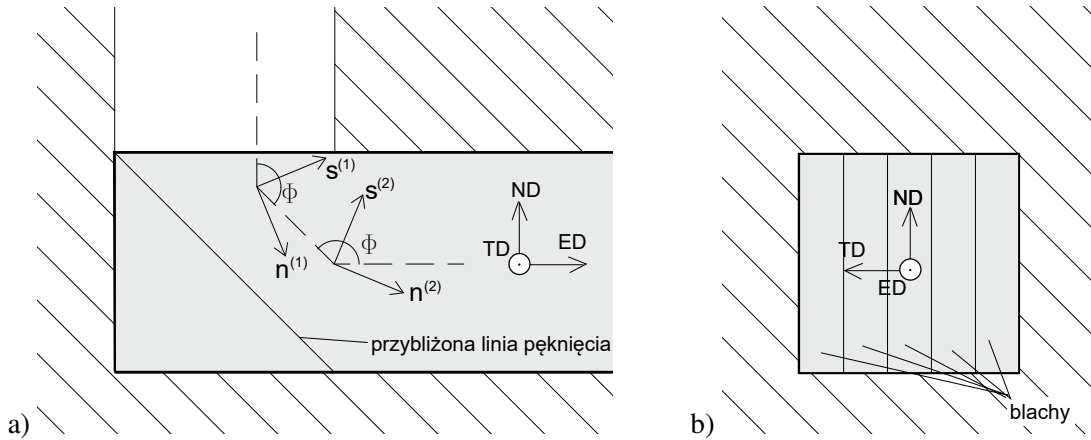
Rysunek 3.26: Figury biegunowe  $\{0001\}$  dla tekstury na różnych etapach ścieżki deformacji dla początkowego promienia  $r_0 = 12\text{mm}$ . Rysunki a-h odpowiadają punktom zaznaczonym na rysunku i.



Rysunek 3.27: Figury biegunowe  $\{0001\}$  dla tekstury na różnych etapach ścieżki deformacji dla początkowego promienia  $r_0 = 16\text{mm}$ . Rysunki a-h odpowiadają punktom zaznaczonym na rysunku i.



Rysunek 3.28: Zestawienie figur biegunowych  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  uzyskanych w symulacji za pomocą modelu dwuskalowego i za pomocą pomiarów eksperymentalnych (Kowalczyk-Gajewska et al., 2015). Figury biegunowe będące wynikiem symulacji zostały przedstawione zarówno jako projekcja stereograficzna dyskretnych orientacji, jak również jako wykres konturowy gęstości orientacji.



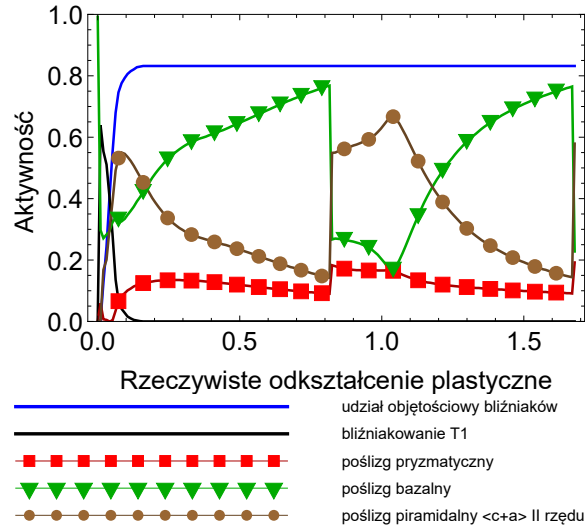
Rysunek 3.29: a) Schemat pęknięcia powstałego przy przeciskaniu próbki ze stopu AZ31b przez kanał kątowy. Na rysunku zaznaczono również wektory określające kierunek i płaszczyznę poślizgu w dwóch prostych ścinaniach użytych do modelowania deformacji materiału. b) Schemat ustawienia blach w kanale.

bie (por. Rys. 3.29b) i tworzących razem kwadratowy przekrój próbki. Użyty materiał miał postać blachy uzyskanej za pomocą technologii Twin Roll Casting, dlatego w modelowaniu zdecydowano się zastosować parametry materiałowe uzyskane dla walcowanej blachy.

W pracy (Gu et al., 2013) nastąpiło pęknięcie materiału schematycznie pokazane na Rys. 3.29a. Z tego powodu autorzy przyjęli, że materiał nie ulegał prostemu ścinaniu na jednej płaszczyźnie ścinania będącej dwusieczną kąta kanału, ale kolejno na dwóch płaszczyznach. Zamiast modelowania jednego przejścia przez kanał ECAP o kącie  $\phi = 90^\circ$  modelowano więc dwa quasi-przejścia przez kanał o kącie  $\phi = 135^\circ$ . W niniejszej rozprawie przyjęto analogiczny sposób modelowania procesu. Wektory  $\mathbf{n}$  i  $\mathbf{s}$  określające płaszczyzny prostego ścinania dla dwóch przejść przez quasi-kanał o kącie  $\phi = 135^\circ$  są określone następująco:

$$\begin{aligned}\mathbf{n}^{(1)} &= (\cos \phi/2, 0, -\sin \phi/2), \mathbf{s}^{(1)} = (\sin \phi/2, 0, \cos \phi/2), \\ \mathbf{n}^{(2)} &= (\sin \phi/2, 0, -\cos \phi/2), \mathbf{s}^{(2)} = (\cos \phi/2, 0, \sin \phi/2).\end{aligned}\quad (3.33)$$

Rys. 3.30 przedstawia aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania uzyskane w symulacji procesu ECAP za pomocą modelu dwuskalowego. Na rysunku dobrze widoczna jest nagła zmiana związana z przejściem między pierwszym, a drugim ścinaniem. Wg przewidywań modelu, większość ziaren uległo zorientowaniu na skutek bliźniakowania. Następnie deformacja zarówno w pierwszym, jak i drugim ścinaniu zachodziła głównie przez poślizg piramidalny  $\langle c+a \rangle$  drugiego rzędu, który stopniowo ustępował miejsca działaniu systemów bazalnych. Rys. 3.31 przedstawia tekstury za pomocą figur biegunowych: a) przyjętą wstępnie oraz uzyskaną w symulacji po b) jednym i c) drugim ścinaniu. Wygenerowano wstępną teksturę, możliwie jak najbardziej podobną do eksperymentalnej (por. 3.31a i (Gu et al., 2013) – Rys. 2a). W modelowaniu jednego przejścia przez kanał uzyskano teksturę podobną do uzyskanej w eksperymencie, ale występują również różnice (por. 3.31c i (Gu et al., 2013) – Rys. 2b). Eksperymentalna figura biegunowa  $\{0001\}$  charakteryzuje się jednym szerokim maksimum, podczas gdy uzyskana w symulacji jest skupiona w dwóch wąskich maksimum. Wydaje się, że w cytowanej pracy do wykonania figur biegunowych użyto konwencji 2. (patrz Dodatek), podczas, gdy autor rozprawy użył konwencji 1. W związku z tym figury biegunowe oznaczone w publikacji jako  $\{10\bar{1}0\}$  powinny być porównywane z figu-



Rysunek 3.30: Aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania w symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy ECAP.

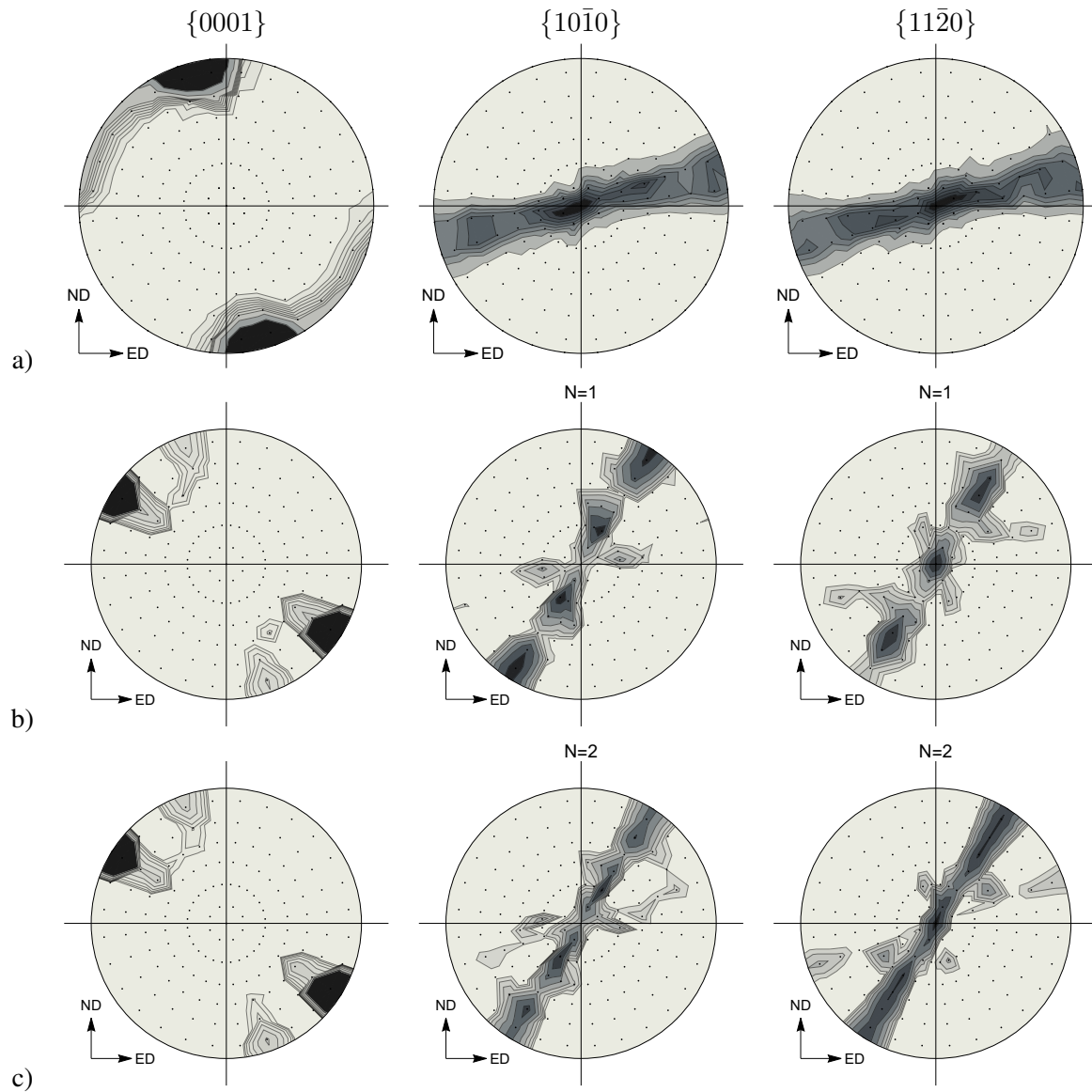
rami biegunowymi  $\{11\bar{2}0\}$  przedstawionymi na Rys. 3.31. Autorom pracy (Gu et al., 2013) udało się lepiej odwzorować eksperymentalne figury biegunowe, należy jednak zwrócić uwagę na dwie kwestie:

- w (Gu et al., 2013) jako wstępnej tekstury użyto danych otrzymanych z eksperymentu. Nie ma wątpliwości, że pełniej odwzorowywały one teksturę materiału niż próba wygenerowania podobnej wizualnie tekstury przyjęta w bieżącej pracy. Ponadto, autorzy pracy podkreślili, że wyniki modelowania są bardzo wrażliwe na wstępną teksturę.
- w (Gu et al., 2013) parametry modelu zostały dobrane tak, aby uzyskana tekstura była jak najbardziej podobna do uzyskanej w eksperymencie przeciskania stopu AZ31b przez kanał kątowy. W takim podejściu trudno mówić o tym, że model przewiduje teksturę.

Warto również podkreślić, że parametry modelu wykorzystanego w symulacji opisanej w bieżącej sekcji zostały dobrane dla materiału o innej historii odkształcenia i temperatury od używanej w cytowanym eksperymencie. Mimo tego, w modelowaniu udało się dość dobrze odwzorować charakter tekstury powstającej w stopie AZ31b poddanym procesowi ECAP w temperaturze pokojowej.

### 3.4 Podsumowanie

W rozdziale opisano sformułowanie wewnętrznie zgodne oraz używane schematy przejścia mikro-makro. Przedstawiono również dobór parametrów modelu dla czystego technicznego tytanu deformowanego w podwyższonych temperaturach w procesach ECAP i KOBO. Dobór parametrów został przeprowadzony w oparciu o wyniki eksperymentalne zaczerpnięte z literatury. Próby eksperymentalne dla wyciskanych prętów ze stopu AZ31b zostały wykonane przez zespół dr Michała Maja, natomiast walcowane blachy z tego materiału były badane przez zespół prof. Zbigniewa Kowalewskiego. Badania te zostały wykonane w instytucie autora rozprawy. Pomiary tekstury krytalograficznej zostały wykonane na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej. W oparciu o wyniki eksperymentalne przeprowadzono optymalizację parametrów modelu dwu-



Rysunek 3.31: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  wykonane dla tekstury: a) wstępnie przyjętej do symulacji, b) w trakcie procesu (po jednym quasi-przejściu), c) po jednym przejściu przez kanał (dwa quasi-przejścia).



skalowego za pomocą algorytmu genetycznego, uzyskując dwa zestawy parametrów, odpowiednio dla próbek z wyciskanego pręta i walcowanej blachy ze stopu AZ31b.

Następnie, korzystając z dobranych parametrów przeprowadzono symulacje rozwoju tekstury czystego technicznie tytanu deformowanego w procesach ECAP i KOBO. Rezultaty symulacji zostały porównane z wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi przez zespół prof. Sztwiertni z Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w Krakowie. Uzyskano dobrą zgodność przewidywanych i mierzonych tekstur. Przy użyciu parametrów uzyskanych na podstawie wyników otrzymanych dla próbek z walcowanej blachy stopu AZ31b wykonano symulację jednego przejścia przez kanał ECAP. Wyniki symulacji porównano z wynikami doświadczenia zaczerpniętymi z literatury. Udało się uzyskać dobrą zgodność przewidywanej tekstury z eksperymentem.

## Rozdział 4

# Trójskalowy model mikromechaniczny polikryształu

### 4.1 Sformułowanie modelu

Trójskalowy model plastyczności kryształów (3SCP - ang. 3-scale crystal plasticity model) (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016) został sformułowany w celu przewidywania rozdrobnienia ziaren, w oparciu o mechanizmy zachodzenia tego zjawiska przedstawione m. in. w pracach (Hughes i Hansen, 1997; Huang, 1998; Kuhlmann-Wilsdorf, 1999; Hansen et al., 2001) i przywołane w sekcji 1.5.2. Schemat modelu przedstawiono na rysunku 4.1.

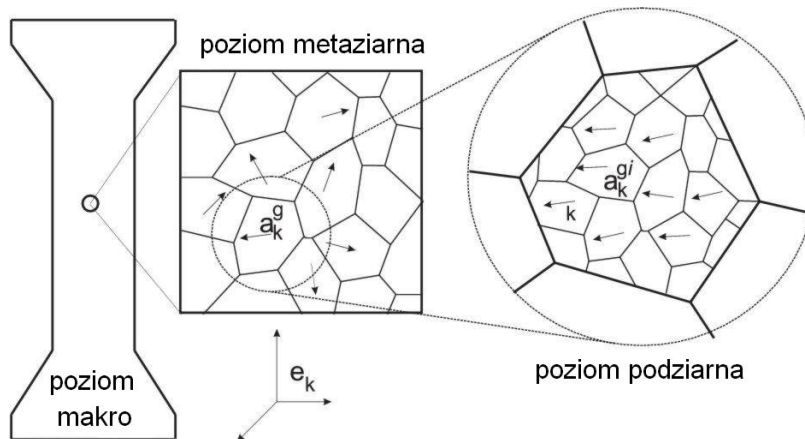
Reprezentatywny element objętości w modelu 3SCP polikryształu to agregat  $NG$  metaziaren. Początkowo, każde metaziarno  $g$  ma orientację nominalną  $\mathbf{Q}^g(0)$ . Każde metaziarno jest agregatem  $NS$  podziaren. Orientacja każdego podziarna  $i$  jest lekko zaburzona względem orientacji metaziarna:

$$\mathbf{Q}_i^g(0) = \mathbf{R}_i^g(0)\mathbf{Q}^g(0), \quad (4.1)$$

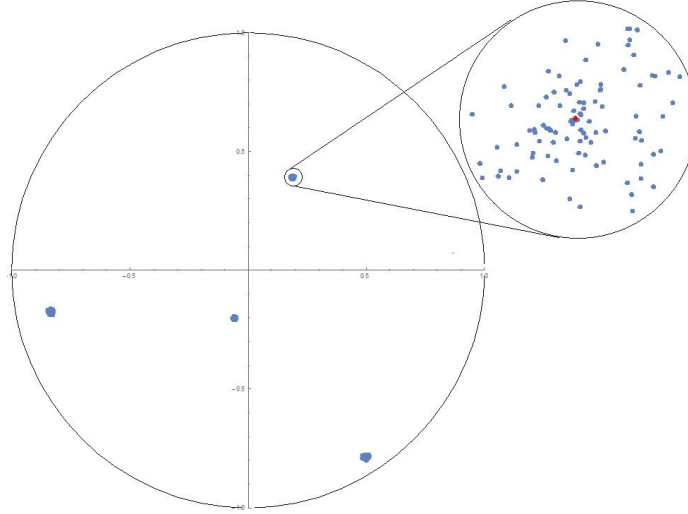
gdzie

$$\mathbf{R}_i^g(0) = \mathbf{R}(\mathbf{n}_i, \delta\psi_i(0)) \quad (4.2)$$

jest macierzą obrotu wokół osi  $\mathbf{n}_i$  o mały kąt  $\delta\psi_i(0) \in \langle 0, \Delta\psi \rangle$ , patrz Rys. 4.2. Oś  $\mathbf{n}_i$  i kąt  $\delta\psi_i$  są generowane losowo dla każdego z podziaren. Celem zaproponowanej struktury agregatu jest od-



Rysunek 4.1: Schemat trójskalowego modelu plastyczności kryształów.



Rysunek 4.2: Figura biegunowa  $\langle 111 \rangle$  przedstawiająca początkowy rozkład orientacji w pojedynczym metaziarnie. Orientacja nominalna metaziarna jest zaznaczona na czerwono.

wzorowanie początkowego stadium rozwoju podstruktury dyslokacyjnej wewnątrz ziarna opisanej w (Hansen et al., 2001; Huang, 1998; Hughes i Hansen, 1997). Podziarno jest modelowane przy użyciu równań teorii plastyczności kryształów dla pojedynczego kryształu, opisanych w rozdziale drugim. Poszczególne poziomy są połączone przy użyciu modelu Taylora lub modeli mikromechanicznych wewnątrznie zgodnych (różne warianty modelu VPSC (Lebensohn i Tomé, 1993)).

Należy tu jednak zauważyć, że przyjmowana w symulacjach liczba podziaren wewnątrz metaziarna nie odnosi się bezpośrednio do liczby bloków komórek w ziarnie obserwowanych doświadczalnie. Podziarno w modelu stanowi raczej statystyczną reprezentację grupy bloków komórek początkowo zorientowanych w podobny sposób względem nominalnej orientacji metaziarna. W związku z tym w modelu nie istnieje parametr rozmiaru podziarna, podobnie jak nie ma takiego parametru w klasycznym modelu dwuskalowym (np. modelu VPSC lub Taylora). Zwiększenie liczby podziaren w metaziarnie polepsza jakość statystycznej reprezentatywności rozkładu orientacji wewnątrz metaziarna, ale prowadzi również do spadku efektywności obliczeniowej.

Podczas deformacji polikryształu następuje ewolucja jego mikrostruktury i osie kryształów podziaren obracają się. Możliwą miarą rozdrobnienia ziaren jest wzrost kątów misorientacji między orientacją podziarna i orientacją metaziarna (zdefiniowaną jak w równaniu 4.8 lub 4.9) lub orientacją losowo wybranego podziarna (należącego do tego samego metaziarna). Kąt  $\delta\psi_i^g(t)$  między orientacją danego podziarna a orientacją zawierającego je metaziarna może być obliczony ze wzoru (Morawiec, 2004):

$$2 \cos(\delta\psi_i^g) = \text{tr}(\mathbf{R}_i^g(t)) - 1, \quad (4.3)$$

gdzie

$$\mathbf{R}_i^g(t) = \mathbf{Q}_i^g(t)\hat{\mathbf{Q}}^g(t)^T \quad (4.4)$$

i  $\hat{\mathbf{Q}}^g(t)$  jest orientacją metaziarna  $g$ .

W przypadku liczenia kątów misorientacji między losowo wybranymi podziarnami kąt  $\delta\psi_{ij}^g(t)$  liczony jest analogicznie do równania (4.3):

$$2 \cos(\delta\psi_{ij}^g) = \text{tr}(\mathbf{R}_{ij}^g(t)) - 1, \quad (4.5)$$

gdzie

$$\mathbf{R}_{ij}^g(t) = \mathbf{Q}_i^g(t) \mathbf{Q}_j^g(t)^T \quad (4.6)$$

jest złożeniem orientacji dwóch losowo wybranych podziaren.

W analizie rozdrobnienia ziaren przy użyciu modelu 3SCP w przypadku braku bliźniakowania wykorzystywano także średnie kąty misorientacji pojedynczych metaziaren i całego agregatu. Są one liczone jako średnie arytmetyczne kątów, odpowiednio podziaren w metaziarnie i metaziaren w agregacie:

$$\delta\bar{\psi}^g = \frac{1}{NS} \sum_i \delta\psi_i^g, \quad \delta\bar{\psi} = \frac{1}{NG} \sum_g \delta\bar{\psi}^g. \quad (4.7)$$

Orientacja metaziarna  $g$ ,  $\hat{\mathbf{Q}}^g(t)$  w równaniu (4.4) może być uzyskana na dwa sposoby. Pierwszy sposób polega na policzeniu orientacji nominalnych metaziaren za pomocą symulacji modelem dwuskalowym:

$$\hat{\mathbf{Q}}^g(t) = \mathbf{Q}^g(t). \quad (4.8)$$

Drugą możliwością jest znalezienie średniej orientacji agregatu podziaren  $g$ :

$$\hat{\mathbf{Q}}^g(t) = \overline{\mathbf{Q}}^g(t). \quad (4.9)$$

Średnia orientacja agregatu podziaren dla metaziarna  $g$  jest definiowana jako orientacja, dla której średni kąt misorientacji  $\delta\bar{\psi}^g$  osiąga minimum (Morawiec, 2004). Orientację tę można uzyskać przez rozwiązanie problemu minimalizacji w przestrzeni tensorów obrotu. Rozwiązanie problemu przedstawia relacja:

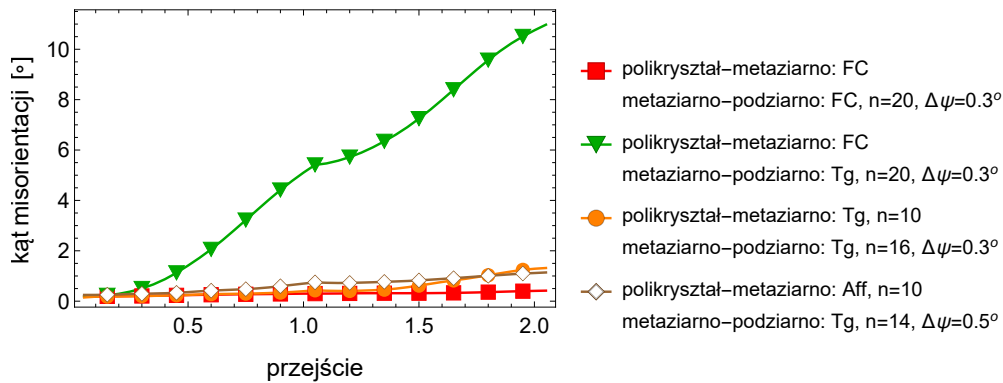
$$\overline{\mathbf{Q}}^g(t) \left( \frac{1}{NS} \sum_i \mathbf{Q}_i^g \right) = \overline{\mathbf{Q}}^g(t) \langle \mathbf{Q}_i^g \rangle = \mathbf{L}, \quad \text{gdzie } \mathbf{L}^2 = \langle \mathbf{Q}_i^g \rangle^T \langle \mathbf{Q}_i^g \rangle \quad (4.10)$$

i  $\mathbf{L}$  jest macierzą symetryczną. Z relacji tej wyznaczamy  $\overline{\mathbf{Q}}^g(t)$ .

## 4.2 Symulacje rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie ECAP dla polikryształów o sieci A1

Wykonano szereg symulacji rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie ECAP (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016) dla materiału metalicznego o sieci A1 (aluminium). Do testowania modelu został użyty materiał o sieci A1, ponieważ mechanizmy rozdrobnienia ziaren w metalach o tej sieci są znacznie lepiej poznane niż analogiczne mechanizmy dla materiału o sieci A3, co ułatwia porównanie wyników z eksperymentem. Przedstawione wyniki będą dotyczyły symulacji deformacji w ścieżce Bc dla kąta kanału  $90^\circ$ . Schemat ścieżki i deformację elementu objętości przedstawia Rys. 1.2. Modelowanie procesu ECAP odbywało się w sposób analogiczny do przedstawionego w sekcji 3.3.1. Parametry modelu pojedynczego ziarna zostały wyskalowane do początkowej wartości krytycznego naprężenia ścinania  $\tau_c^0$ :  $h_0 = 16.625\tau_c^0$ ,  $\tau_{sat} = 9.9\tau_c^0$ ,  $\beta = 2.5$ ,  $q = 1.6$ ,  $\bar{n} = 10$  lub  $20$ ,  $\dot{\gamma}_0 = 10^{-3}$  1/s.

Symulacje rozwoju mikrostruktury za pomocą modelu trójskalowego wykonano dla różnych wariantów przejścia mikro-makro. Wyniki symulacji zostały opisane w kolejnych sekcjach.

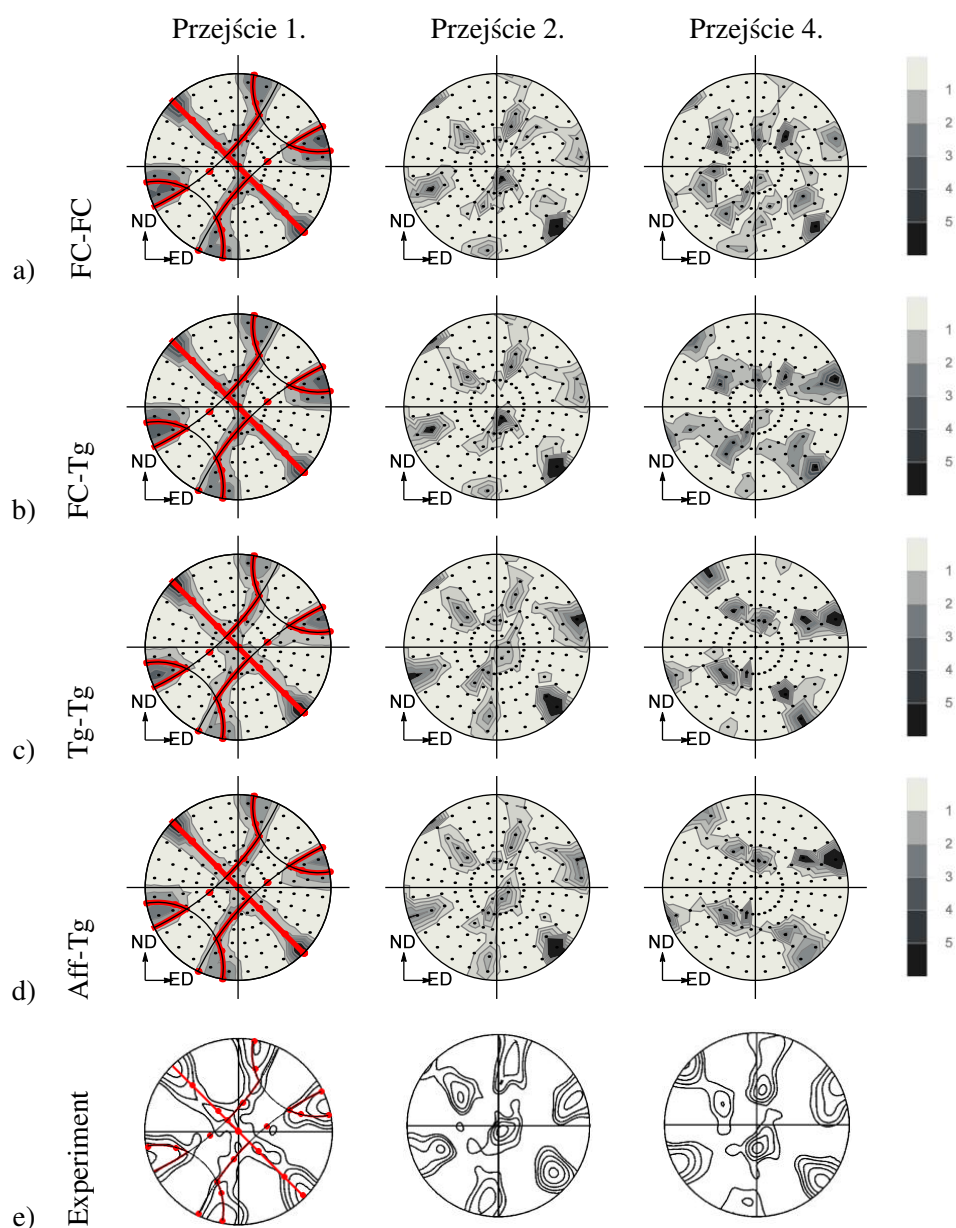


Rysunek 4.3: Rozwój średniego kąta misorientacji  $\delta\bar{\psi}$  dla agregatu metaziaren. Wykresy otrzymano używając różnych wariantów modelu 3SCP (notacja: FC - model Taylora, Tg - model styczny VPSC, Aff - model afiniczny VPSC).

#### 4.2.1 Model Taylora jako model przejścia między poziomem polikryształu i metaziarna

Na początku wykonano symulacje procesu ECAP używając modelu Taylora (FC – ang. full constraint) jako przejścia między poziomem polikryształu i metaziarna. Założono więc, że każde z metaziaren ulega takiej samej deformacji. Jako schemat przejścia między poziomem metaziarna i podziarna używano modelu Taylora lub wariantu stycznego (Tg – tangent) modelu VPSC. W dalszej części powyższe warianty modelu trójskalowego będą oznaczane odpowiednio jako FC-FC i FC-Tg. Wstępną teksturę materiału w modelu trójskalowym uzyskano na podstawie tekstury zawierającej 1000 losowych orientacji. W pierwszej kolejności spośród zestawu 1000 orientacji początkowej losowej tekstury wybrano co 10. orientację otrzymując zestaw 100 losowych orientacji metaziaren. Następnie, dla każdego z metaziaren wygenerowano dwa zestawy 100 orientacji podziaren, dla maksymalnych kątów  $\Delta\psi$  odpowiednio  $0.3^\circ$  i  $1^\circ$ . W dalszej kolejności wykonano symulacje modelem VPSC dla każdego z metaziaren. Z powodu założenia Taylora w każdym przypadku zadawany był taki sam gradient prędkości. Obliczenia zostały wykonane dla dwóch różnych wartości wykładnika  $\bar{n}$  w prawie potęgowym 2.22, mianowicie dla  $\bar{n} = 10$  i  $\bar{n} = 20$ . Na Rys. 4.3 przedstawiono wykresy średnich kątów misorientacji dla całego elementu objętości. Wszystkie kąty misorientacji użyte do wykonania wykresu zostały policzone między orientacjami poszczególnych podziaren, a średnią orientacją w metaziarnie zawierającym dane podziarno. Krzywa oznaczona kwadratami została wykonana na podstawie wyników modelu z przejściem Taylora na obu poziomach (FC-FC). Krzywa oznaczona trójkątami odnosi się do wyników modelu FC-Tg (model Taylora na poziomie wyższym, a model styczny VPSC na niższym). Jak widać, w modelu FC-Tg przewidywane są znacznie wyższe kąty misorientacji niż w modelu FC-FC.

W celu modelowania rozwoju tekstury polikryształu, wykonano symulacje dla wartości wykładników  $\bar{n} = 10$  i  $\bar{n} = 20$ . W tym przypadku do wygenerowania 1000 metaziaren użyto pełnego zestawu 1000 losowych orientacji. Dla każdego z metaziaren wygenerowano 100 lekko zaburzonych orientacji podziaren dla maksymalnej wartości kąta  $\Delta\psi = 0.3^\circ$ . Otrzymane w tak wykonanych symulacjach tekstury dla przypadków FC-FC i FC-Tg przedstawia Rys. 4.4 a i b. Wartości funkcji rozkładu orientacji (ODF – ang. orientation distribution function) przedstawia Tab. 4.1.



Rysunek 4.4: Figury biegunowe  $\langle 111 \rangle$  otrzymane w symulacji procesu ECAP (ścieżka Bc, kąt kanału  $\phi = 90^\circ$ ) przy użyciu modelu 3SCP w wariacie: a) FC-FC, b) FC-Tg, c) Tg-Tg, d) Aff-Tg (notacja: FC - model Taylora, Tg - model styczny VPSC, Aff - model afiniczny VPSC). e) Wyniki eksperymentalne dla miedzi dostępne w pracy (Beyerlein i Tóth, 2009), izolinie: 1/1.4/2/2.8/4 mr. Czerwone linie i punkty oznaczają idealne komponenty tekstury dla polikryształu o sieci A1 deformowanego w pojedynczym przejściu przez kanał kątowy wyznaczone przez Li et al. (2005).

| Model  | Przejście | $A_1$  | $A_2$ | $\bar{A}$ | $A$    | $C$    | $\bar{B}$ | $B$    |
|--------|-----------|--------|-------|-----------|--------|--------|-----------|--------|
| FC-FC  | 1         | 17.194 | 1.116 | 5.43      | 3.964  | 14.576 | 4.861     | 7.8    |
|        | 2         | 17.831 | 0.224 | 0.633     | 18.829 | 5.863  | -0.309    | 1.028  |
|        | 3         | 33.572 | 1.764 | 1.901     | 19.11  | 0.074  | -0.75     | 0.251  |
|        | 4         | 28.645 | 0.84  | 0.24      | 8.689  | 2.32   | -0.015    | -0.09  |
| FC-Tg  | 1         | 17.997 | 1.141 | 5.16      | 4.3    | 15.6   | 4.903     | 7.817  |
|        | 2         | 18.522 | 1.36  | 0.274     | 18.505 | 6.27   | 0.629     | 3.723  |
|        | 3         | 38.37  | 0.44  | 0.796     | 13.962 | 2.119  | -0.897    | 1.348  |
|        | 4         | 27.163 | 1.352 | 1.496     | 3.769  | 0.715  | 0.068     | 1.948  |
| Tg-Tg  | 1         | 12.586 | 4.373 | 7.437     | 6.453  | 6.367  | 5.307     | 6.22   |
|        | 2         | 15.24  | 1.339 | 0.294     | 2.345  | 3.853  | 5.24      | 11.392 |
|        | 3         | 19.641 | 0.038 | -0.057    | 0.797  | 1.133  | 0.006     | 9.261  |
|        | 4         | 25.011 | 1.2   | 0.289     | 0.523  | 0.081  | -0.014    | 2.12   |
| Aff-Tg | 1         | 14.919 | 4.006 | 5.406     | 6.278  | 10.66  | 6.807     | 9.342  |
|        | 2         | 22.51  | 1.885 | 0.129     | 3.566  | 6.278  | 1.278     | 8.543  |
|        | 3         | 26.366 | 0.472 | 0.355     | 2.548  | 2.775  | -0.214    | 6.249  |
|        | 4         | 40.855 | 2.456 | 0.66      | 0.364  | -0.451 | -0.356    | 2.551  |

Tablica 4.1: Wartości ODF dla komponentów obróconej tekstury ścinania uzyskane w modelu 3SCP obliczone przy użyciu programu JTEX (Fundenberger i Beausir, 2015).

#### 4.2.2 Model VPSC jako model przejścia między poziomami polikryształu i metaziarna

W celu wyeliminowania wpływu uproszczeń modelu Taylora przeprowadzono testy dla modelu z przejściem VPSC na obu poziomach, nazywanym dalej wariantem VPSC-VPSC. W tym celu *nie* zdecydowano się jednak na modyfikację kodu VPSC w celu prowadzeniu symulacji równocześnie we wszystkich trzech skalach dla każdego kroku czasowego. Zastosowano natomiast podejście dwuetapowe: w pierwszym kroku dla zestawu 1000 losowych orientacji wykonywana była symulacja modelem dwuskalowym. W ten sposób uzyskiwano ewolucję lokalnych gradientów prędkości dla każdego z metaziaren. W pierwszym przybliżeniu spośród 1000 metaziaren wybierano 100. Początkowe orientacje były następnie zaburzane w celu utworzenia dwóch zestawów po 100 podziaren. W dalszej kolejności powyższą procedurę wykonano również dla pełnego zestawu 1000 metaziaren. Drugi krok polegał na przeprowadzeniu symulacji modelem VPSC dla każdego metaziarna, zadając gradienty prędkości uzyskane w modelu dwuskalowym VPSC.

Pierwsze symulacje wykonano dla 100 metaziaren i przejścia mikro-makro przy użyciu wariantu stycznego VPSC na obu poziomach (wariant Tg-Tg). Użyto dwóch wartości wykładnika w prawie potęgowym 2.22:  $\bar{n} = 10$  i  $\bar{n} = 16$  oraz takich samych wartości kąta  $\Delta\psi$  jak w poprzednich symulacjach. Uzyskane w symulacji średnie kąty misorientacji są przedstawione na rysunku 4.3 (linia z kołami). W wariacie Tg-Tg, podobnie jak w wariacie FC-FC kąty misorientacji podziaren względem średnich orientacji zawierających je metaziaren rosną w bardzo ograniczonym zakresie. Na podstawie powyższych wyników wysnuto przypuszczenie, że użycie podobnych schematów przejścia między skalami na obu poziomach prowadzi do zahamowania rozdrobnienia metaziaren. Metaziarna ulegają natomiast rozdrobnieniu w przypadku użycia „sztywnego” modelu Taylora do przejścia między poziomem polikryształu i metaziarna oraz bardziej „podatnego” wariantu stycznego modelu VPSC do przejścia między poziomem metaziarna i podziarna. Ewolucję kątów misorientacji podziaren w takim wariacie umożliwia podatność modelu VPSC na poziomie metaziarna. Wybór modelu VPSC na poziomie niższym i modelu Taylora na poziomie wyższym (a nie odwrotnie) jest uzasadniony tym, że ważniejsze jest prawidłowe uwzględnienie lokalnych wariacji stanu naprężenia i odkształcenia, natomiast założenie jednorodnej deformacji jest bardziej słuszne na wyższym poziomie analizy.

Wykonano również symulację dla pełnego zestawu 1000 metaziaren dla  $\bar{n} = 16$  i  $\Delta\psi = 0.3^\circ$ . Uzyskaną w symulacji teksturę przedstawia Rys. 4.4c. Wartości ODF przedstawia Tab. 4.1 (Tg-Tg). W pracy (Enikeev et al., 2007) podano zmierzone eksperymentalnie wartości komponentów tekstury ścinania dla przeciskania miedzi przez kanał ECAP w ścieżce C. Symulacje modelem 3SCP opisywane w bieżącej sekcji zostały przeprowadzone dla ścieżki Bc procesu, dlatego możliwe jest porównywanie jedynie wyników po pierwszym przejściu, po którym w eksperymencie opisanym w pracy (Enikeev et al., 2007) otrzymano względnie silny komponent „C”. Ta obserwacja została lepiej odwzorowana w symulacjach przy użyciu wariantów FC-FC i FC-Tg niż Tg-Tg. Z drugiej strony, tekstura uzyskana w wariacie Tg-Tg jest słabsza niż FC-FC i FC-Tg i pod tym względem bliższa wynikom eksperymentalnym. Wyniki eksperymentalne po pierwszym przejściu przez kanał dla miedzi deformowanej w ścieżce Bc procesu ECAP (Beyerlein i Tóth, 2009) (por. Rys. 4.4e) zostały dobrze odwzorowane za pomocą wszystkich opisanych wyżej modeli. Po przejściu czwartym dobre przewidywanie dały modele FC-Tg i Tg-Tg, natomiast w wariacie FC-FC uzyskano gorszą zgodność. Nie jest to zaskakujące, ponieważ model Taylora ma ograniczone możliwości przewidywania prawidłowej tekstury po kilkukrotnych przejściach przez kanał kątowy (Beyerlein i Tóth, 2009; Tóth et al., 2010b).

Opierając się na założeniu, że modele używane do przejścia między skalami na wyższym i niższym poziomie powinny się różnić, wykonano kolejną symulację modelem VPSC-VPSC. Tym ra-



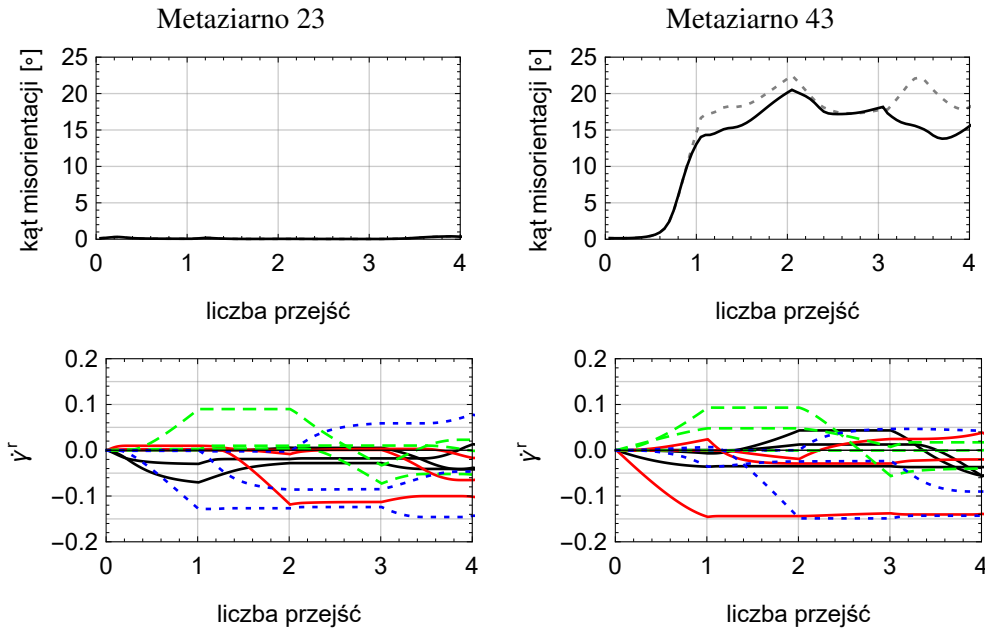
zem użyto schematu afinicznego (Aff) VPSC i za jego pomocą przeprowadzono symulację modelem dwuskalowym, w której wyznaczono zmienne gradienty prędkości dla każdego z 1000 metaziaren. Na niższym poziomie modelu użyto wariantu Tg, który różni się od wariantu Aff. Poza tym procedura wyglądała podobnie jak w modelu Tg-Tg. Tym razem użyto jednak innych wartości wykładnika w prawie potęgowym ( $\bar{n} = 7$  i  $\bar{n} = 14$ ) i wartości kąta  $\Delta\psi = 0.5^\circ$  i  $\Delta\psi = 1^\circ$ . Rozwój średniego kąta misorientacji dla agregatu otrzymany we wstępnej symulacji dla 100 metaziaren na Rys. 4.3 przedstawia linia oznaczona pustymi rombami. Jak widać, użycie dwóch różnych wariantów modelu VPSC nie spowodowało wzrostu kątów misorientacji podziaren. Rys. 4.4d przedstawia tekstury uzyskane w symulacji dla zestawu 1000 metaziaren w wariacie Aff-Tg modelu 3SCP. Odpowiednie wartości komponentów tekstury przedstawia Tab. 4.1 (Aff-Tg). Otrzymana tekstura jest względnie silna, co można tłumaczyć wpływem modelu afinicznego, który przewiduje rozwój silnych tekstur (por. (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016)).

W tym miejscu należy wyjaśnić, dlaczego model VPSC-VPSC nie przewiduje rozdrobnienia ziaren, które przewiduje model FC-Tg. Koncepcja modelu 3SCP jest oparta na założeniu, że podziarno oddziałuje przede wszystkim ze swoim bliskim sąsiedztwem (efektywnym ośrodkiem reprezentującym uśrednione zachowanie podziaren należących do tego samego metaziarna). Oddziaływanie między podziarnem, a całym polikryształem nie są natomiast tak silne. Ewolucji kątów misorientacji podziaren towarzyszy zmiana właściwości ośrodka reprezentującego metaziarno. Model Taylora nie pozwala na żadną redystrybucję odkształcenia między metaziarnami. Redystrybucja odkształceń w wariacie FC-Tg jest więc możliwa tylko między podziarnami w metaziarnie, bo na tym poziomie używany jest model VPSC, co prowadzi do dużych niejednorodności odkształcenia między podziarnami w danym metaziarnie, a co za tym idzie dużego średniego kąta misorientacji. Użycie modelu VPSC na obu poziomach pozwala na redystrybucję odkształcenia na obu poziomach przejścia między skalami, co prowadzi do mniejszej niejednorodności odkształcenia w danym metaziarnie. W podziarnach działają wtedy podobne zestawy systemów poślizgu, co przyczynia się do braku powstawania dużych kątów misorientacji między nimi. Z kolei w modelu FC-FC redystrybucja odkształceń jest zablokowana na obu poziomach, co jeszcze bardziej ogranicza rozdrobnienie ziaren (por. Rys. 4.3).

### 4.2.3 Wpływ aktywności systemów poślizgu na ewolucję kątów misorientacji

Na podstawie przeprowadzonych symulacji przeanalizowano korelacje między aktywnością systemów poślizgu a kątami misorientacji podziaren. Rys. 4.5 przedstawia ewolucję kątów misorientacji dla dwóch wybranych metaziaren, oznaczonych numerami 23 i 43, zestawioną z wykresami aktywności systemów poślizgu. Ewolucja kątów misorientacji została uzyskana w wariacie FC-Tg modelu 3SCP, natomiast aktywności systemów poślizgu w modelu dwuskalowym z przejściem za pomocą modelu Taylora. Linie o takim samym stylu na wykresach aktywności odnoszą się do współpłaszczyznowych systemów poślizgu. Można zauważyć, że występuje korelacja między wzrostem kąta misorientacji a aktywnością systemów poślizgu. W metaziarnie 23. nie ma rozwoju misorientacji, co jest związane z tym, że w pierwszym przejściu przez kanał katowy tylko cztery systemy poślizgu wykazują znaczącą aktywność. W metaziarnie 43. początkowo również nie ma rozwoju misorientacji, a wyraźną aktywność wykazują tylko cztery systemy poślizgu. Sytuacja zmienia się jednak, gdy rośnie aktywność kolejnych dwóch systemów. Prowadzi to do szybkiego wzrostu misorientacji między podziarnami w metaziarnie.

Podsumowując, im większa liczba równocześnie aktywnych systemów poślizgu w danym metaziarnie, tym większy średni kąt misorientacji. Powyższy wniosek jest zgodny z obserwacją, że rozdrobnienie następuje, gdy w różnych obszarach ziarna działają inne systemy poślizgu (por. np. (Hughes i Hansen, 1997)), można bowiem podejrzewać, że jeśli w danym metaziarnie jest aktywnych



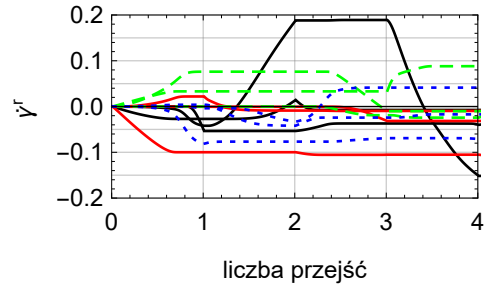
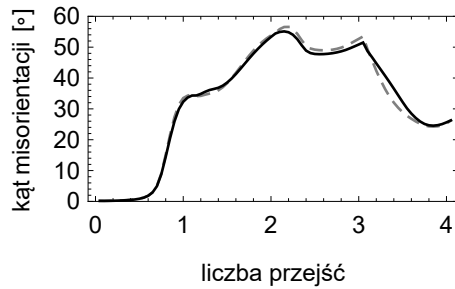
Rysunek 4.5: Ewolucja średniego kąta misorientacji  $\bar{\delta\psi}^g$  w modelu trójskalowym FC-Tg (linia ciągła – kąt liczony względem średniej orientacji w metaziarnie, linia przerywana – kąt liczony względem aktualnej orientacji metaziarna wyznaczonej w modelu dwuskalowym FC) oraz aktywność systemów poślizgu (linie o tym samym stylu odnoszą się do systemów współpłaszczyznowych) w modelu dwuskalowym dla dwóch wybranych metaziaren dla symulacji czterech przejść przez kanał ECAP w ścieżce Bc.

wiele systemów poślizgu, to istnieje duże prawdopodobieństwo, że w sąsiadujących podziarnach aktywne będą różne systemy poślizgu. Ponadto, wyniki są zgodne z obserwacjami stwierdzającymi, że powstawanie granic dużego kąta silnie zależy od orientacji krystalograficznej (Hughes i Hansen, 1997). Można to zaobserwować na Rys. 4.5: metaziarna 23. i 43. różnią się od siebie jedynie orientacją (kąty Eulera wynoszą odpowiednio:  $212.05^\circ$ ,  $87.93^\circ$ ,  $268.47^\circ$  i  $10.49^\circ$ ,  $65.37^\circ$ ,  $19.87^\circ$ ), ale działająca deformacja prowadzi do powstawania w każdym z nich zupełnie innej podstruktury. Ponadto, można zauważyć, że w przypadku wzrostu kąta misorientacji, wzrasta również różnica między kątem misorientacji obliczonym względem dwóch różnych orientacji odniesienia (linia czarna ciągła i przerywana), co dodatkowo podkreśla, że deformacja metaziarna w tym przypadku nie może być traktowana jako jednorodna.

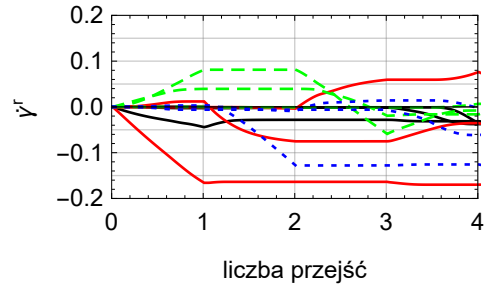
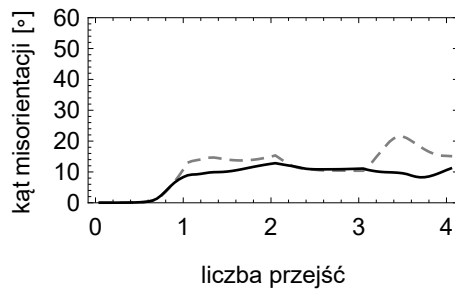
W celu zweryfikowania hipotezy głoszącej, że ewolucja misorientacji podziaren w modelu 3SCP jest związana z aktywnością różnych systemów poślizgu w podziarnach zbadano aktywności systemów w podziarnach obu rozważanych metaziaren. Rys. 4.6 przedstawia rozwój kąta misorientacji i aktywności systemów poślizgu dla dwóch podziaren w metaziarnie 43. Przyglądając się wykresom można zauważyć, że występują istotne różnice w aktywnościach systemów poślizgu dla podziaren. Przykładowo, w trakcie pierwszego przeciskania w podziarnie 10. aktywnych jest osiem systemów poślizgu, a w podziarnie 50. pięć. Powyższa różnica prowadzi do znaczącego wzrostu kąta misorientacji. Rys. 4.7 przedstawia analogiczne wykresy dla metaziarna 23. Jak łatwo zauważyć, aktywności systemów poślizgu dla podziaren są prawie identyczne. Skutkuje to bardzo niskimi kątami misorientacji (warto zauważyć, że wykresy rozwoju kąta są inaczej wyskalowane niż na Rys. 4.6). Powyższa analiza potwierdza, że wzrost kąta misorientacji obserwowany w symu-

**Metaziarno 43**

Podziarno 10



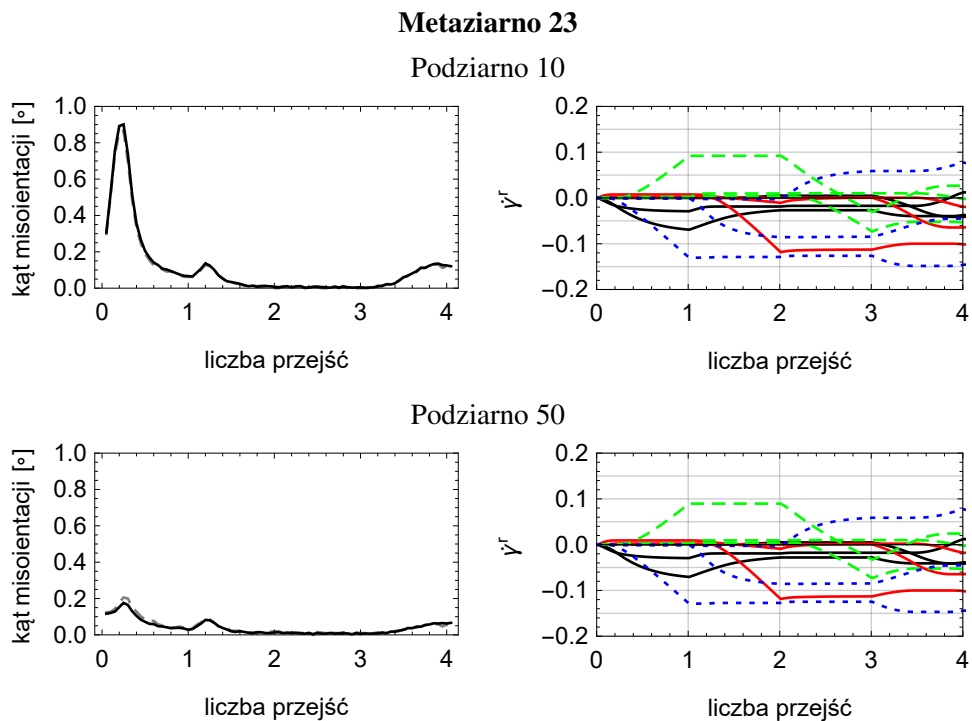
Podziarno 50



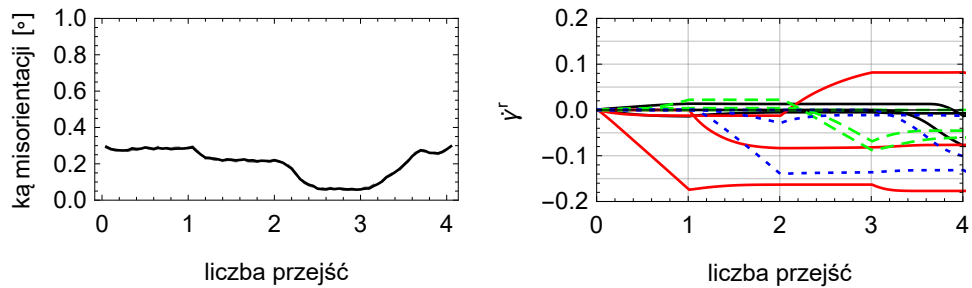
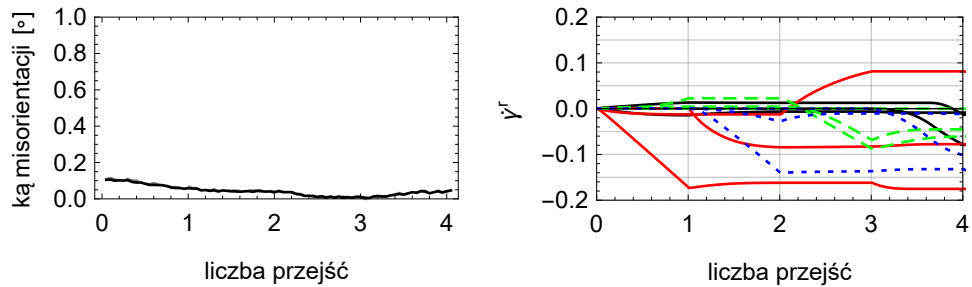
Rysunek 4.6: Zmiany kąta misorientacji  $\delta\psi_i^g$  i aktywności systemów poślizgu uzyskane w symulacji modelem 3SCP FC-Tg czterech przejść przez kanał kątowy w ścieżce Bc. Wykresy wykonano dla dwóch wybranych podziaren metaziarna 43. Kąt misorientacji: linia ciągła - kąt liczony względem średniej orientacji w metaziarnie, linia przerywana - kąt liczony względem aktualnej orientacji metaziarna wyznaczonej w modelu dwuskalowym FC. Aktywność systemów poślizgu: linie o tym samym stylu odnoszą się do systemów współpłaszczyznowych.

lacjach modelem 3SCP dla materiału o sieci A1 wynika z różnych aktywności systemów poślizgu w podziarnach.

Warto również przyjrzeć się bliżej brakowi wzrostu kąta misorientacji w modelu VPSC-VPSC. Na Rys. 4.8 pokazano rezultaty analogiczne do pokazanych na Rys. 4.6 otrzymane za pomocą wariantu Tg-Tg. Metaziarno 43 miało taką samą orientację, jak poprzednio, jak jednak łatwo zauważyć aktywności systemów poślizgu dla podziaren są prawie identyczne, co skutkuje brakiem wzrostu kąta misorientacji.



Rysunek 4.7: Zmiany kąta misorientacji  $\delta\psi_i^g$  i aktywności systemów poślizgu uzyskane w symulacji modelem 3SCP FC-Tg czterech przejść przez kanał kątowy w ścieżce Bc. Wykresy wykonano dla dwóch wybranych podziaren metaziarna 23. Kąt misorientacji: linia ciągła - kąt liczony względem średniej orientacji w metaziarnie, linia przerywana - kąt liczony względem aktualnej orientacji metaziarna wyznaczonej w modelu dwuskalowym FC. Aktywność systemów poślizgu: linie o tym samym stylu odnoszą się do systemów współpłaszczyznowych.

**Metaziarno 43.****Podziarno 10.****Podziarno 50**

Rysunek 4.8: Zmiany kąta misorientacji  $\delta\psi_i^g$  i aktywności systemów poślizgu uzyskane w symulacji modelem 3SCP Tg-Tg czterech przejść przez kanał kątowy w ścieżce Bc. Wykresy wykonano dla dwóch wybranych podziaren metaziarna 43. Kąt misorientacji: linia ciągła - kąt liczony względem średniej orientacji w metaziarnie, linia przerywana - kąt liczony względem aktualnej orientacji metaziarna wyznaczonej w modelu dwuskalowym Tg. Aktywność systemów poślizgu: linie o tym samym stylu odnoszą się do systemów współpłaszczyznowych.

#### 4.2.4 Porównanie z wynikami eksperymentalnymi dla czystego aluminium i stopu aluminium

Przewidywania modelu 3SCP w wariacie FC-Tg zostały porównane z obserwacjami doświadczalnymi z prac (Kawasaki et al., 2009) i (Xu et al., 2011). Rys. 4.9 i 4.10 przedstawiają zestawienie rozkładów kątów misorientacji otrzymanych w symulacji (lewa kolumna) i eksperymencie (prawa kolumna). Otrzymano dość dobrą zgodność między przewidywaniami modelu i danymi z eksperymentów. Wyniki zbliżone do wyników danego eksperymentu można otrzymać zmieniając parametry modelu 3SCP, mianowicie wartość wykładnika  $\bar{n}$  w prawie potęgowym oraz maksymalny wstępny kąt zaburzenia  $\Delta\psi$ . Mimo, że wyniki symulacji i doświadczeń wykazują znaczące podobieństwo, należy podkreślić, że porównywane wielkości nie są do końca takie same. Kawasaki et al. (2009) oraz Xu et al. (2011) mierzyli kąty misorientacji na granicach ziaren, natomiast przy przetwarzaniu wyników modelu 3SCP, misorientacje były liczone względem średniej orientacji w każdym z me-taziaren.

### 4.3 Symulacje rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie walcowania na zimno materiału o sieci A3

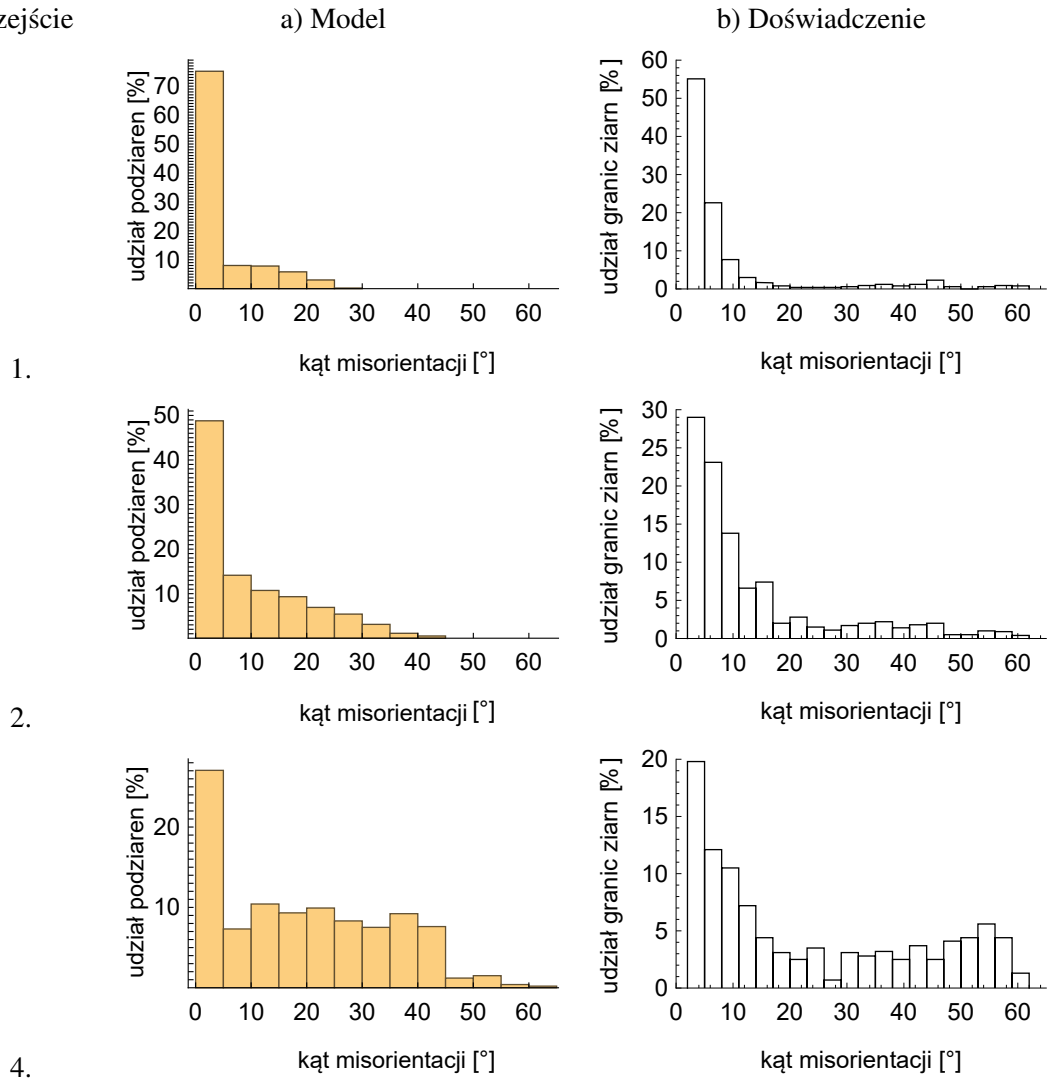
Koncepcja modelu trójskalowego opiera się na obserwacjach rozwoju mikrostruktury metali o sieci A1. Mimo tego, podjęto próbę zastosowania modelu 3SCP do modelowania rozwoju mikrostruktury metali o sieci A3 poddanych dużym odkształceniom plastycznym. Materiałem, który poddano analizie był czysty tytan. Powodem wyboru tego metalu, była jego wysoka temperatura topnienia powodująca, że w materiale tym podczas walcowania na zimno temperatura nie powinna wzrosnąć do poziomu pozwalającego na rekrytalizację dynamiczną. W porównaniu do materiałów o sieci A1 mechanizmem mającym bardzo istotny wpływ na rozdrobnienie ziaren w czystym tytanie jest bliźniakowanie. Powoduje ono powstawanie struktur lamelarnych oddzielonych od matrycy ziarna granicami wysokiego kąta.

Ewolucję mikrostruktury blach z czystego tytanu w procesie walcowania na zimno analizowano w pracach (Chun et al., 2005; Bozzolo et al., 2007; Zhong et al., 2008; Zharebtsov et al., 2011, 2013). W pracy (Bozzolo et al., 2007) przedstawiono wyniki modelowania tekstury tytanu podczas walcowania na zimno przy użyciu programu VPSC (Lebensohn i Tomé, 1993). Pozostałe prace (Chun et al., 2005; Zhong et al., 2008; Zharebtsov et al., 2011, 2013) dotyczyły jedynie analizy zjawisk obserwowanych eksperymentalnie. W żadnej z wymienionych prac nie przedstawiono modelowania rozdrobnienia ziaren zachodzącego w materiale poddanym walcowaniu.

W cytowanych pracach (Chun et al., 2005; Bozzolo et al., 2007; Zhong et al., 2008; Zharebtsov et al., 2011, 2013) stwierdzono, że:

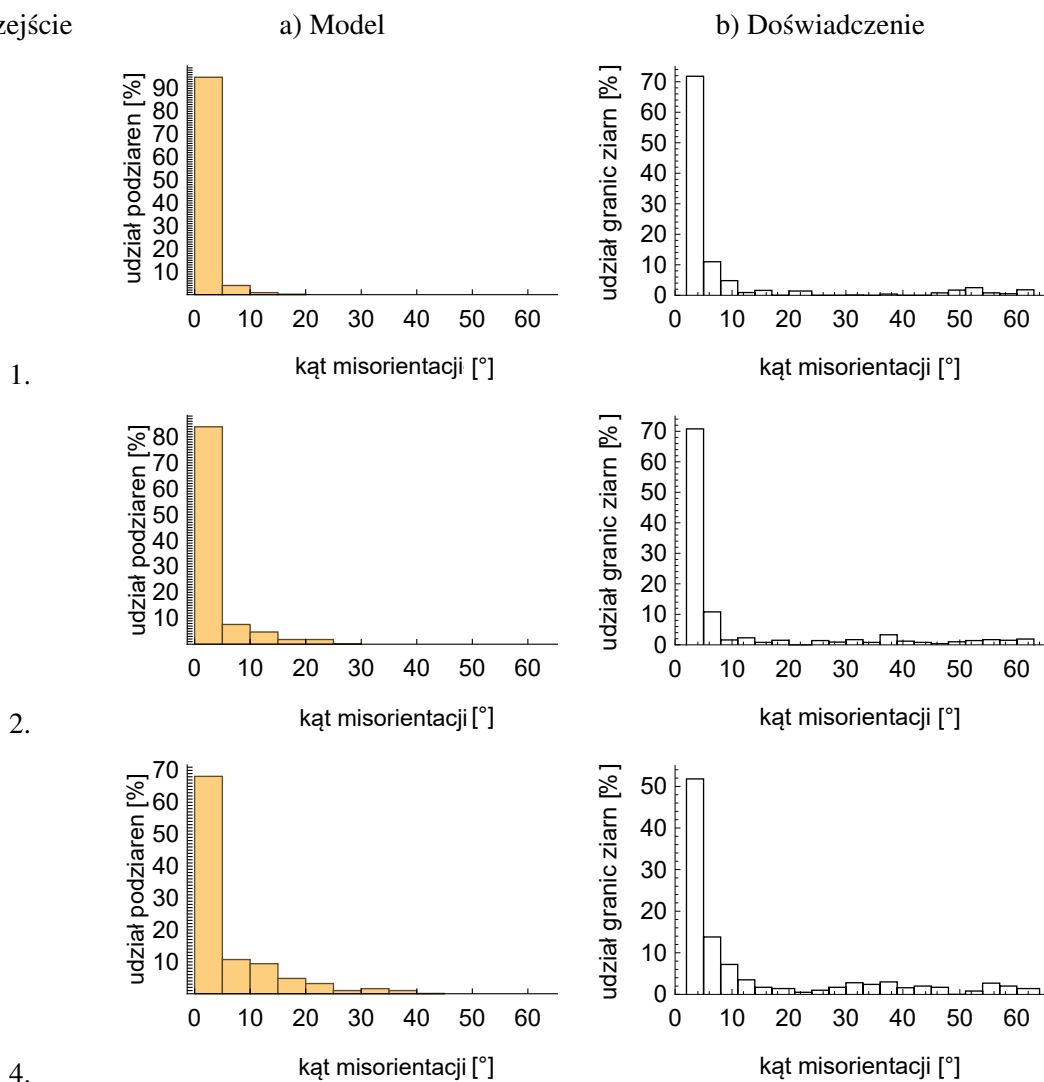
- Aktywne są systemy bliźniakowania rozciągającego T1  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$  i skracającego C1  $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$ .
- Bliźniakowanie T1 wymaga do uruchomienia niższego naprężenia stycznego niż C1, ale z uwagi na teksturę początkowo uruchamiane jest przede wszystkim bliźniakowanie C1. Następnie wewnątrz bliźniaków C1 powstają bliźniaki T1.
- Bliźniakowanie ma istotny wpływ na rozwój tekstury i rozdrobnienie ziaren, szczególnie w początkowym etapie deformacji. Powstają wtedy granice bliźniacze będące granicami wysokiego kąta oraz następuje reorientacja zbliźniaczonych fragmentów skutkująca zmianami tekstury.

Przejście



Rysunek 4.9: Rozkłady kątów misorientacji  $\delta\bar{\Psi}^g$  po 1, 2 i 4 przejściach procesu ECAP (ścieżka Bc,  $90^\circ$ ) otrzymane w: a) symulacjach za pomocą wariantu FC-Tg modelu 3SCP dla materiału o sieci A1 ( $\bar{n} = 20$  i  $\Delta\psi = 0.3^\circ$ ) i b) doświadczeniu przeprowadzonym na próbce z czystego aluminium (Kawasaki et al., 2009).

Przejście



Rysunek 4.10: Rozkłady kątów misorientacji  $\delta\bar{\Psi}^g$  po 1, 2 i 4 przejściach procesu ECAP (ścieżka Bc,  $90^\circ$ ) otrzymane w: a) symulacjach za pomocą wariantu FC-Tg modelu 3SCP dla materiału o sieci A1 ( $\bar{n} = 10$  i  $\Delta\psi = 0.3^\circ$ ) i b) doświadczeniu przeprowadzonym na próbce ze stopu Al-1% Mg (Xu et al., 2011).



Tablica 4.2: Parametry dwuskalowego modelu plastyczności kryształu dobrane dla blachy z czystego tytanu wyznaczone w celu modelowania walcowania na zimno. Mając na celu zwięzłość opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: prism. (pryzmatyczny), basal (bazalny), 1. pyr. <c+a> (piramidalny <c+a> pierwszego rzędu), T1 (bliźniakowanie rozciągające T1), C1 (bliźniakowanie skracające C1), slip (poślizg) i twin (bliźniakowanie).

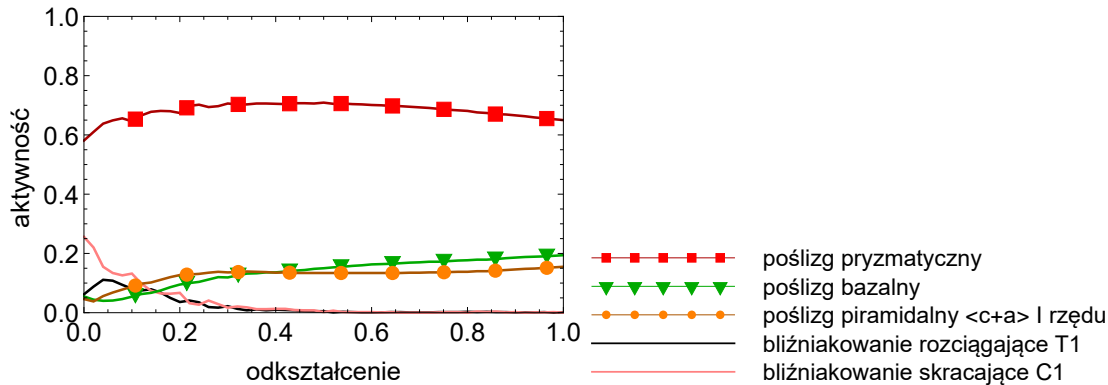
| System       | Oddziaływanie | $\tau_{c0}$<br>[MPa] | $h_0$<br>[MPa] | $\beta$ | $\tau_{sat}/f_{sat}$<br>[MPa]/- | $\mu$<br>- | $q$    |       |                   |
|--------------|---------------|----------------------|----------------|---------|---------------------------------|------------|--------|-------|-------------------|
|              |               |                      |                |         |                                 |            | prism. | basal | pyr <c+a><br>twin |
| prism.       | slip-slip     | 140                  | 250            | 1       | 160                             | 1          | 1      | 1     |                   |
|              | slip-twin     | —                    | 0              | —       | 1                               | —          | 2,0    |       |                   |
| basal        | slip-slip     | 412                  | 1              | 1       | 2000                            | 2          | 1,8    | 1,8   |                   |
|              | slip-twin     | —                    | 0,88           | —       | 1,53                            | —          | 2,0    |       |                   |
| 1. pyr <c+a> | slip-slip     | 412                  | 1              | 1       | 2000                            | 2          | 1,8    | 1,8   |                   |
|              | slip-twin     | —                    | 1,88           | —       | 1,53                            | —          | 2,0    |       |                   |
| T1           | twin-slip     | —                    | 10             | 1       | 1                               | —          | 1      | 1     |                   |
|              | twin-twin     | 198                  | 1,62           | —       | 0,68                            | 1          | 1      |       |                   |
| C1           | twin-slip     | —                    | 10             | 1       | 1                               | —          | 1      | 1     |                   |
|              | twin-twin     | 280                  | 1,7            | —       | 0,3                             | 1          | 1      |       |                   |

- Dla większych odkształceń bliźniakowanie wysycza się i głównym mechanizmem odpowiedzialnym za deformację plastyczną stają się poślizgi, przede wszystkim po płaszczyznach pryzmatycznych  $\{10\bar{1}0\}$ . Następuje dalsze rozdrobnienie ziaren spowodowane mechanizmami analogicznymi do występujących w materiałach o sieci A1.

### 4.3.1 Dobór parametrów modelu

W celu wykonania symulacji modelem trójskalowym należy najpierw dysponować zestawem parametrów dla modelu dwuskalowego, które są potrzebne do symulacji dla każdego z metaziaren. Parametry używane w poprzednim rozdziale do symulacji procesów KOB0 i ECAP zostały uznane za nieodpowiednie, ponieważ deformacja w temperaturze pokojowej zachodzi w inny sposób niż deformacja w temperaturach wyższych. W szczególności obecne jest bliźniakowanie skracające C1  $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ , które nie było uwzględniane w poprzednim rozdziale. Parametry modelu dwuskalowego używane w modelu 3SCP zostały wyznaczone przy pomocy wariantu stycznego. Dobrano je tak, aby prawidłowo przewidzieć ewolucję tekstury powstającej podczas walcowania blachy tytanu na zimno, przy uwzględnieniu informacji zawartych w poprzednim akapicie. Dokładny poziom naprężeń nie był istotny, dlatego w celu odtworzenia krzywej naprężenie-odkształcenie należałoby odpowiednio przeskalować parametry. W bieżącym zadaniu istotne były natomiast względne wartości parametrów dla różnych rodzin systemów poślizgu i bliźniakowania. Dobre parametry modelu przedstawia Tab. 4.2.

Na Rys. 4.11 przedstawiono aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania w symulacji walcowania na zimno. Największą aktywność w całym zakresie deformacji przejawia poślizg pryzmatyczny, co jest uzasadnione zarówno jego najniższym CRSS, jak i teksturą odpowiednią dla działania tej rodziny systemów. Początkowo drugim, najbardziej aktywnym systemem deformacji było bliźniakowanie C1, które było aktywne mimo stosunkowo wysokiego CRSS z powodu korzystnej dla jego aktywacji tekstury. Następnie aktywowane było bliźniakowanie T1, działające przede



Rysunek 4.11: Wykres aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania uzyskany w symulacji walcowania na zimno przy użyciu modelu dwuskalowego dla dobranych parametrów.

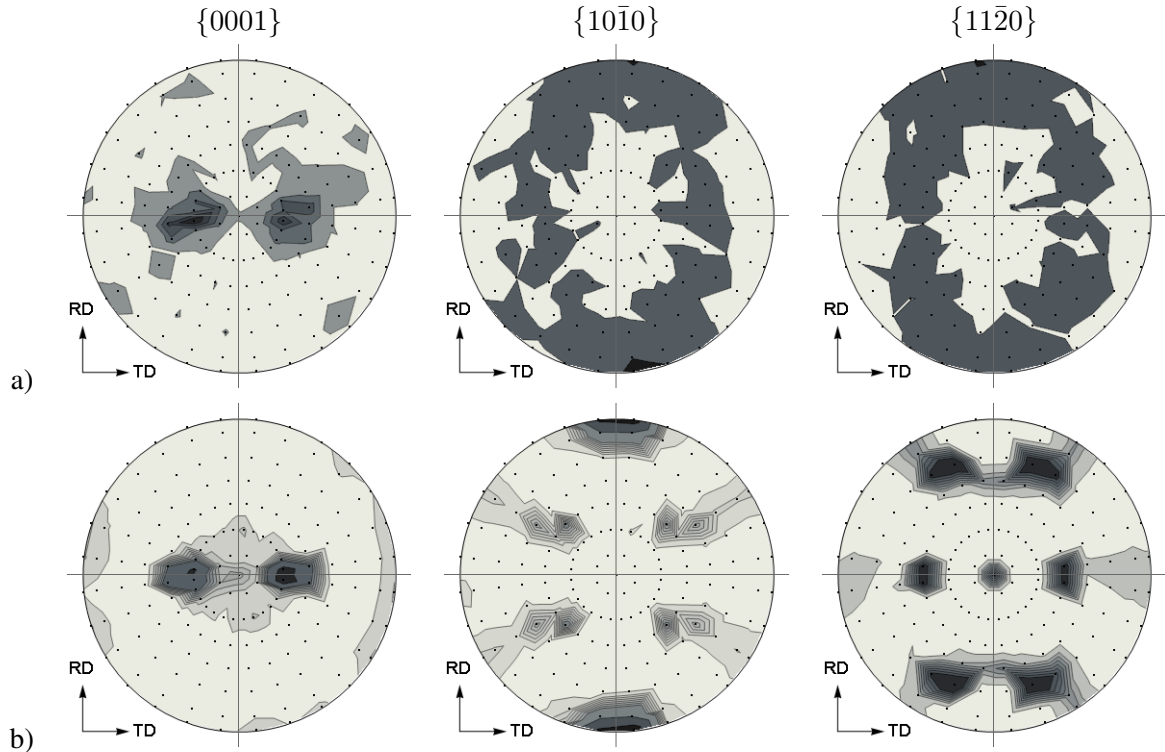
wszystkim jako bliźniakowanie wtórne (secondary twinning). Po wysyceniu bliźniakowania deformacja przez poślizg przyzmatyczny była uzupełniana przez poślizgi bazalny i piramidalny.

Rys. 4.12 przedstawia tekstury: a) przyjętą wstępnie i b) uzyskaną po zakończeniu symulacji procesu walcowania za pomocą dobranych parametrów. Należy tu zaznaczyć, że przedstawione tekstury uzyskano stosując konwencję 2. (por. Dodatek). Konwencja ta została wybrana w celu bezpośredniego odniesienia się do wyników eksperymentalnych, ponieważ używano jej we wszystkich cytowanych tu pracach dotyczących rozwoju tekstury tytanu w czasie walcowania. Parametry modelu dwuskalowego zostały dobrane tak, aby uzyskać dobrą zgodność przewidywanej tekstury z teksturami mierzonymi eksperymentalnie i przedstawionymi w pracach (Chun et al., 2005) i (Zhong et al., 2008).

#### 4.3.2 Symulacja rozwoju mikrostruktury czystego tytanu podczas walcowania na zimno

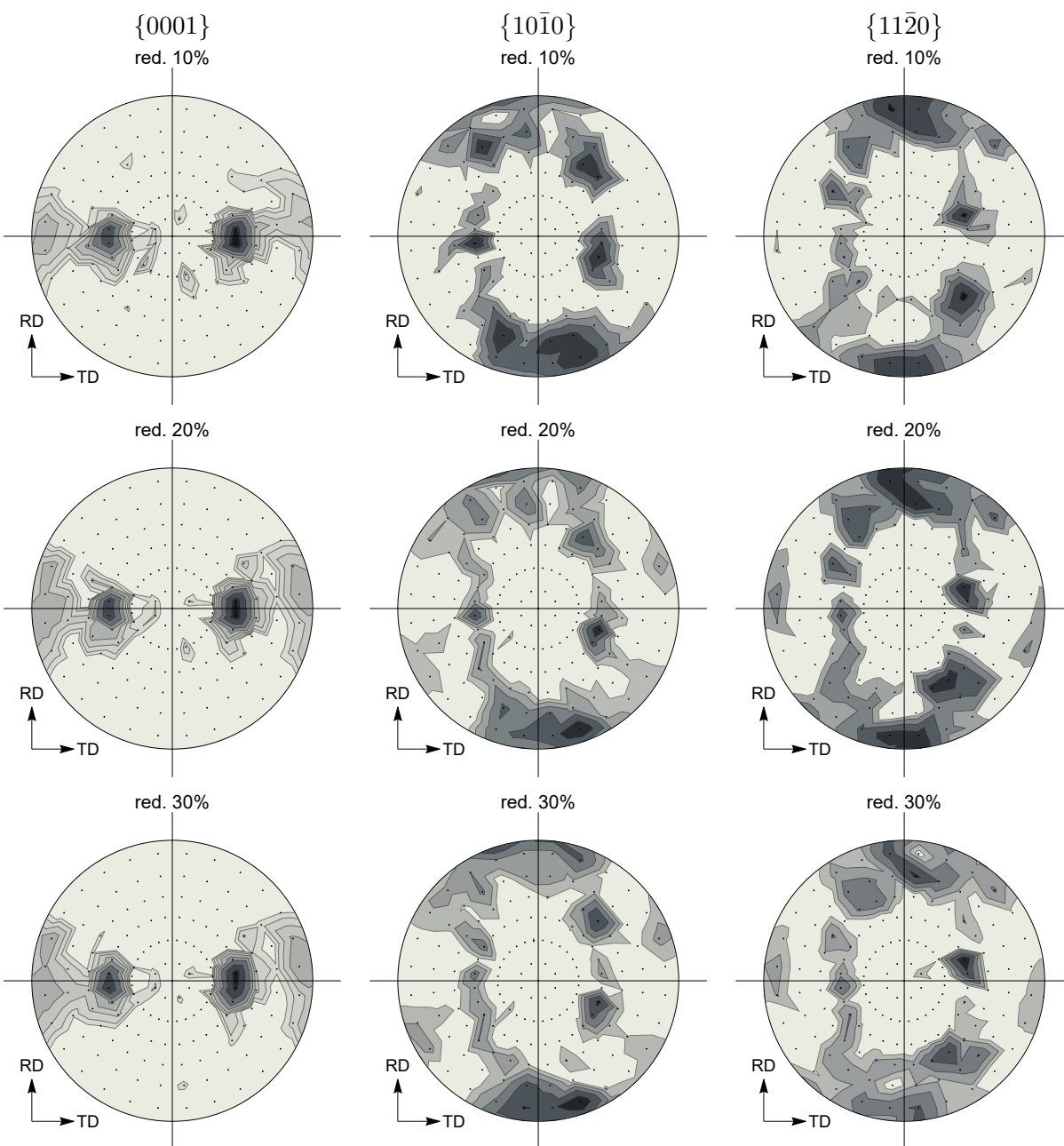
Następnie wykonano symulację modelem 3SCP procesu walcowania dla wartości  $\bar{n}=10$  i 20 oraz  $\Delta\Psi = 0, 3^\circ$ . Rysunki 4.13 i 4.14 przedstawiają figury biegunowe uzyskane w symulacji modelem 3SCP. Używając modelu trójskalowego w wariantcie FC-Tg udało się poprawnie przewidzieć końcowe tekstury walcowania otrzymywane w eksperymentach, por. (Chun et al., 2005) – Rys. 6. i 9., (Bozzolo et al., 2007) – Rys. 1., (Zhong et al., 2008) – Rys. 8. i (Zherebtsov et al., 2011) – Rys. 5. W szczególności udało się przewidzieć powstawanie dwóch włókien osi „c” nachylonych względem kierunku normalnego do płaszczyzny blachy (figura biegunowa  $\{0001\}$ ). Udało się również przewidzieć położenie maksimów na figurach biegunowych  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$ . Nie udało się natomiast przewidzieć przejściowego powstawania włókna osi „c” normalnego do płaszczyzny blachy. Włókno to obserwowano w pracach (Chun et al., 2005; Bozzolo et al., 2007; Zhong et al., 2008). Początkowo jego intensywność rosła, później jednak malała. W pracy (Zherebtsov et al., 2011) nie zaobserwowano powstawania tego włókna, a w pracy (Bozzolo et al., 2007) jego obecność przypisano wielokrotnej reorientacji na skutek bliźniakowania.

Na rysunku 4.15 przedstawiono rozkłady kątów misorientacji uzyskane w eksperymencie (Chun et al., 2005) i w modelu. Rozkłady uzyskano poprzez liczenie kątów misorientacji między losowo wybranymi podziarnami w każdym z metaziaren. Dla każdego z podziaren można wylosować pewną liczbę „sąsiadów” – podziaren należących do tego samego metaziarna. Oszacowano, że w rzeczywistości podziarna mają około 12 sąsiadów. Wykonano rozkład kątów misorientacji, losując po 12 sąsiadów dla każdego z podziaren. Następnie, przeprowadzono analogiczną procedurę,

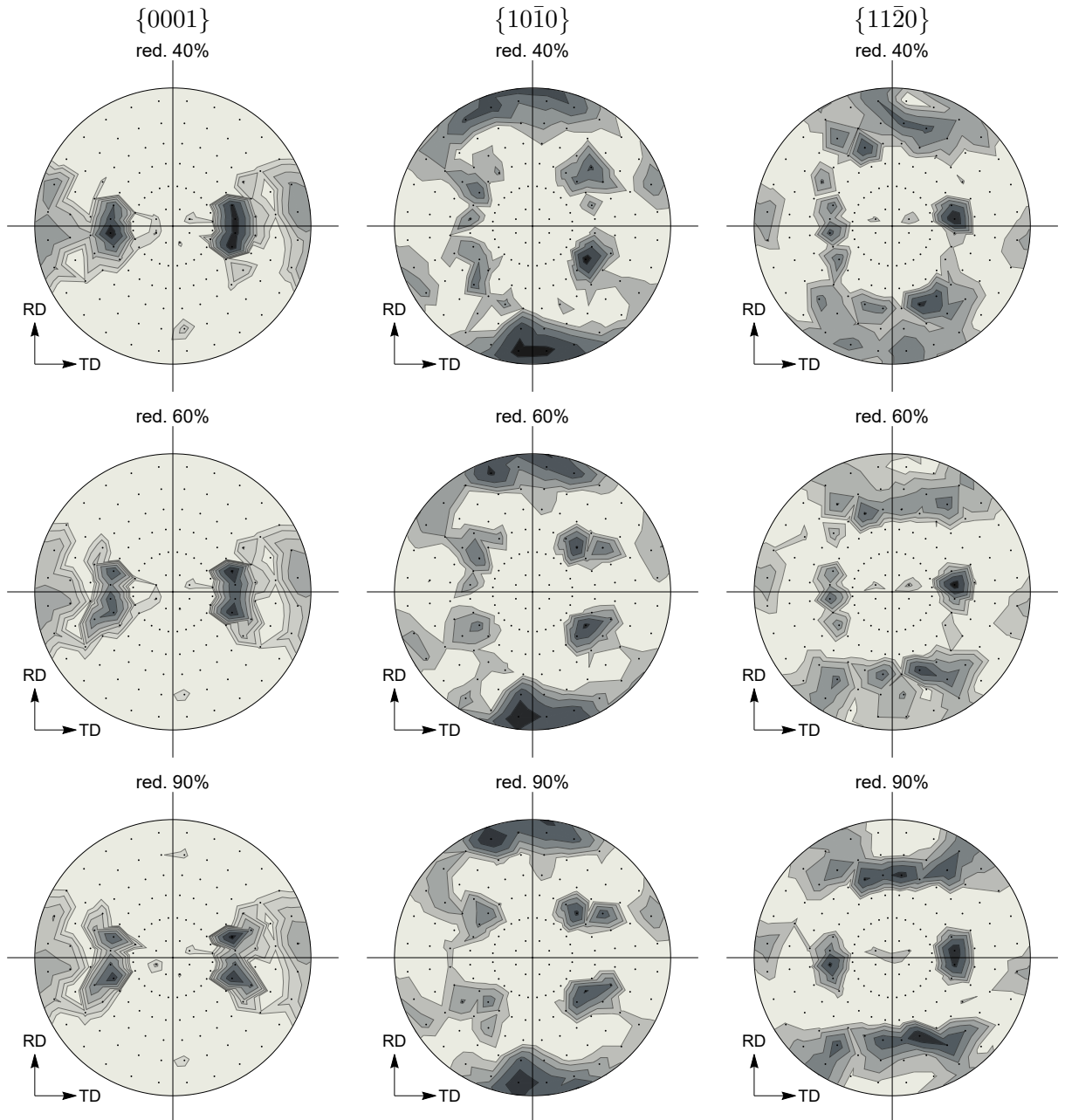


Rysunek 4.12: Figury biegunowe wykonane dla tekstury a) wstępnie przyjętej, b) uzyskanej po symulacji walcowania na zimno przy użyciu modelu dwuskalowego dla dobranych parametrów.

ale z losowaniem tylko jednego sąsiada dla każdego z podziaren. Nie znaleziono istotnych różnic między tak otrzymanymi rozkładami. Z tego powodu przedstawione tu wyniki zostały uzyskane dla jednego losowo wybranego sąsiada dla każdego z podziaren, co pozwoliło na znaczne zwiększenie efektywności obliczeniowej. W kolumnie b) przedstawione są rozkłady uzyskane dla wszystkich wylosowanych par. W symulacji udało się jakościowo przewidzieć dwa obserwowane w eksperymencie maksima w okolicach kątów misorientacji  $64,4^\circ$  oraz  $85,0^\circ$ . Na rozkładach uzyskanych w symulacji i widocznych w kolumnie b) widoczne jest również maksimum w okolicach kąta  $48,4^\circ$ . Jest to kąt misorientacji najczęściej występujący między wtórnym bliźniakiem, a ziarnem przed reorientacją. Wydaje się, że pik ten nie jest obserwowany w eksperymencie, ponieważ liczba i długość granic między drugorzędnymi bliźniakami, a niezbliźnioną orientacją ziarna jest niewielka. Z tego powodu wyniki przedstawione w kolumnie c) zostały uzyskane bez brania pod uwagę misorientacji między dwukrotnie zreorientowanymi podziarnami i ziarnami przed reorientacją. Dla tak uzyskanych wyników istnieje jakościowa zgodność położenia i wzajemnego stosunku wysokości pików z eksperymentem. W symulacji nie udało się niestety przewidzieć procentowego udziału granic niskiego kąta. W każdym przypadku liczba granic niskiego kąta uzyskana w symulacji jest niższa niż w eksperymencie. Może to być skutkiem uproszczeń używanej w modelu 3SCP procedury reorientacji. Procedura została napisana tak, aby prawidłowo przewidywać teksturę materiału oraz aby udział objętościowy zreorientowanych obszarów był zgodny z udziałem objętościowym bliźniakowania wynikającym z jego aktywności. W procedurze reorientowane są całe ziarna. W modelu trójskalowym prowadzi to do powstawania struktur bliźniaczych wewnątrz metaziaren. W rzeczywistych mikrostrukturach wewnątrz bliźniaków mogą powstawać podstruktury dyslokacyjne, które są odpowiedzialne za wzrost udziału granic niskiego kąta obserwowany w eksperymencie. Model



Rysunek 4.13: Figury biegunowe płaszczyzn sieciowych  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  uzyskane w symulacji walcowania modelem 3SCP do redukcji 10, 20 i 30%.



Rysunek 4.14: Figury biegunowe płaszczyzn sieciowych  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  uzyskane w symulacji walcowania modelem 3SCP do redukcji 40, 60 i 90%.

3SCP nie jest niestety w stanie przewidzieć powstawania tych podstruktur. W tym celu musiałby powstać kolejny poziom, na którym podziarno mogłoby ulegać dalszemu rozdrobieniu.

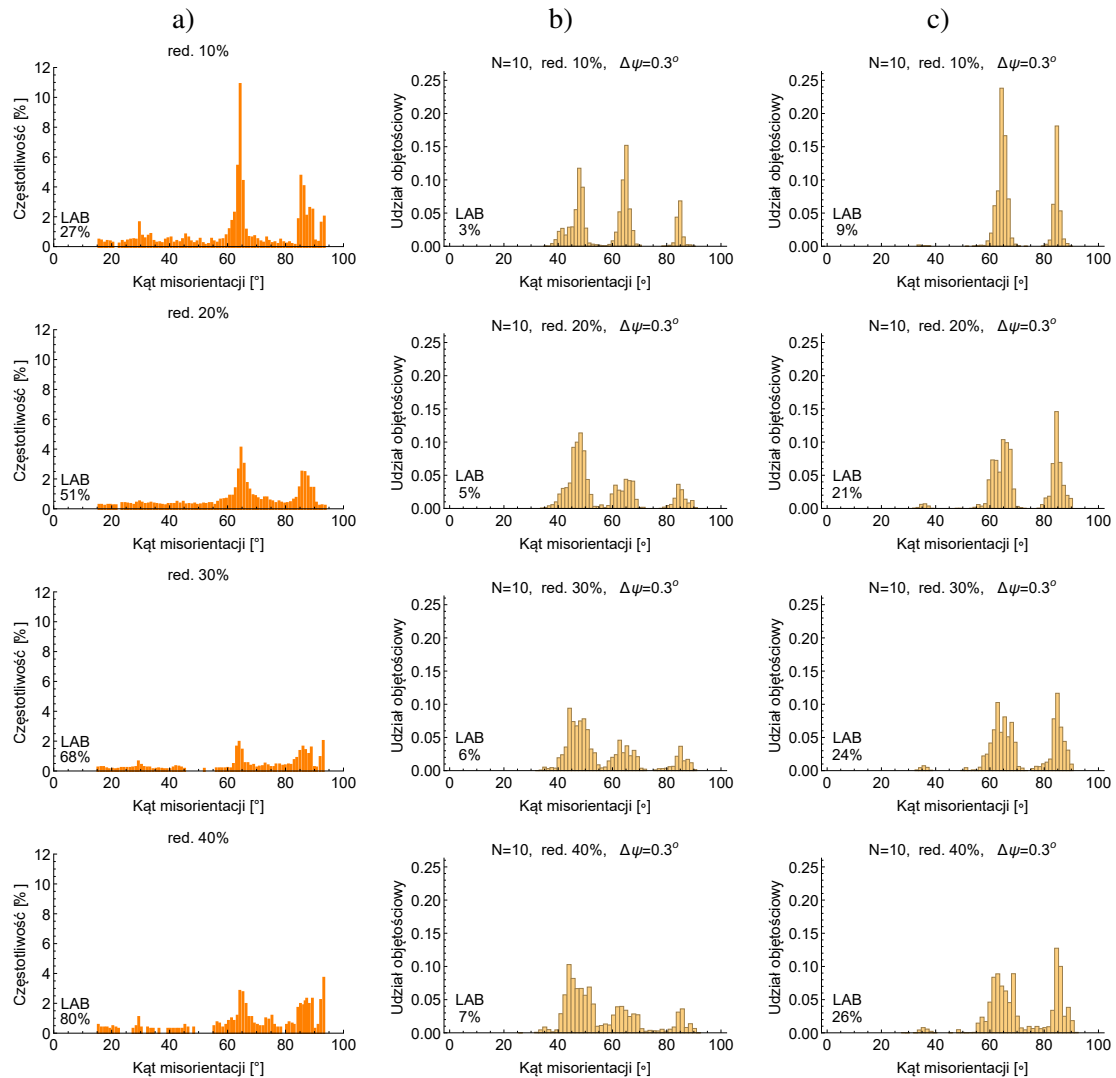
## 4.4 Podsumowanie i wnioski

Wykonano symulacje rozwoju mikrostruktury metali o sieci A1 i A3 za pomocą trójskalowego modelu plastyczności kryształów (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016). W zaproponowanym modelu pojedyncze ziarno polikryształu jest początkowo dzielone na pewną liczbę podziaren o orientacjach lekko zaburzonych względem orientacji macierzystego ziarna. W nomenklaturze modelu 3SCP zbiór podziaren nazywany jest metaziarnem. Na podstawie przeprowadzonych studiów jako modele przejścia między skalami wybrane zostały model Taylora (polikryształ-metaziarno) i wariant styczny modelu VPSC (metaziarno-podziarno). W przypadku modelowania materiału o sieci A1 powyższy wybór schematów przejścia mikro-makro pozwolił na działanie różnych systemów poślizgu w podziarnach należących do jednego metaziarna. Prowadzi to do wzrostu misorientacji między podziarnami, a w konsekwencji powstawania między nimi granic niskiego, a następnie wysokiego kąta. Jak już stwierdzono wcześniej, czynnikiem decydującym o rozwoju misorientacji między ziarnami jest wstępna orientacja metaziarna.

Model 3SCP ma kilka zalet w porównaniu do istniejących podejść. Pomysł modelu został oparty na podstawach fizycznych, według których deformacja zachodząca przez poślizgi na różnych systemach w sąsiednich obszarach kryształu prowadzi do rozdrobnienia ziaren. Leffers (2001a; 2001b) zbudował swój model opierając się na podobnych założeniach. W przeciwieństwie do modelu Leffersa model 3SCP nie wymaga jednak zadania początkowej orientacji mikrostruktury, co pozwala na użycie go dla dowolnego procesu deformacji. Ponadto, w modelu brana jest pod uwagę niejednorodność odkształceń wewnątrz ziaren, która nie jest rozważana w modelu rozdrobnienia opartym na zmianie kształtu (Beyerlein et al., 2003) i modelu opartym na teorii dysklinacji (Nazarov et al., 2006; Enikeev et al., 2007). Ponadto model jest konkurencyjny obliczeniowo, ponieważ liczba ziaren podczas symulacji nie wzrasta co dzieje się zarówno we wspomnianych modelach (Beyerlein et al., 2003; Nazarov et al., 2006; Enikeev et al., 2007), jak i w modelu opartym na koncepcji zakrzywienia sieci (Tóth et al., 2010b).

Przewidywania modelu dla materiału o sieci A1 porównano z danymi doświadczalnymi dotyczącymi rozwoju tekstury, dostępnymi w (Beyerlein i Tóth, 2009) i rozdrobnienia ziaren, dostępnymi w (Kawasaki et al., 2009) i (Xu et al., 2011) dla deformacji w czterech przejściach przez kanał kątowy w ścieżce Bc. W obu przypadkach otrzymano satysfakcjonującą zgodność z eksperymentem.

W literaturze nie spotkano się z modelem zdolnym do przewidywania rozkładów kąta misorientacji w mikrostrukturze metali o sieci A3, dlatego przedstawiony w rozprawie przykład można uznać za pionierski. Zastosowanie modelu 3SCP do modelowania rozdrobnienia ziaren w metalach o sieci A3, nawet w przypadku odkształcenia na zimno napotyka jednak na trudności spowodowane obecnością bliźniakowania. Za pomocą modelu 3SCP udało się prawidłowo odwzorować obecność pików związanych z obecnością bliźniakowania na rozkładach kątów misorientacji. Nie udało się natomiast przewidzieć udziału granic niskiego kąta. W tym celu należałoby zbudować model czteroskalowy, lub w inny sposób uwzględnić powstawanie podstruktury dyslokacyjnej wewnątrz bliźniaków.



Rysunek 4.15: Rozkłady kątów misorientacji dla blachy z czystego tytanu walcowanej na zimno do redukcji 12, 20, 30 i 40% uzyskane w a) eksperymencie (Chun et al., 2005) i w symulacji modelem trójskalowym: b) dla wszystkich losowych par wewnątrz metaziarna, c) bez par między bliźniakiem wtórnym, a orientacją oryginalną. Skrót LAB oznacza udział granic niskiego kąta (ang. low angle boundaries).

## Rozdział 5

# Model kontynualny MES

Model plastyczności kryształów używany na poziomie pojedynczego ziarna został opisany w rozdziale drugim. Model został zaimplementowany na poziomie pojedynczego punktu całkowania (IP – ang. integration point) elementu w metodzie elementów skończonych (MES). Tego typu sformułowanie oznaczane jest w rozprawie skrótem CPFEM (ang. Crystal Plasticity Finite Element Method). W sekcji pierwszej opisana została implementacja w MES modelu plastyczności kryształów dla metali deformujących się przez poślizg i bliźniakowanie. Sekcja druga dotyczy modelowania ewolucji tekstury i rozdrobnienia ziaren materiału o sieci A1 deformowanego w procesie ECAP. Założono, że w tym przypadku deformacja plastyczna zachodzi jedynie przez poślizg. W sekcji trzeciej przedstawione zostały wyniki symulacji prób eksperymentalnych dla stopu AZ31b. Wyniki modelowania rozwoju mikrostruktury stopu AZ31b deformowanego w procesie ECAP zawarto w sekcji czwartej. Należy zaznaczyć, że w sekcjach trzeciej i czwartej zostały pokazane wstępne wyniki symulacji dla implementacji, która nie jest jeszcze dostatecznie przetestowana w odniesieniu do aktywności mechanizmu bliźniakowania i uwzględnienia związanej z tym reorientacji sieci krystalograficznej.

### 5.1 Implementacja

Sformułowanie CPFEM używane w niniejszej rozprawie to sformułowanie lagranżowskie z niejawnym schematem całkowania Eulera nieliniowych równań konstytutywnych i hipersprężystym równaniem konstytutywnym 2.19 w punkcie Gaussa. Implementacja modelu MES dla materiału o sieci A1 została wykonana zarówno dla modelu zależnego, jak i niezależnego od skali czasu. W celu uniknięcia problemów z niejednoznacznością wyboru aktywnych systemów poślizgu w sformułowaniu niezależnym od skali czasu, podążając za (Kucharski et al., 2014; Petryk et al., 2016) zastosowano regularyzowane prawo Schmidta 2.25, (Gambin, 1991, 1992). Model CPFEM dla stopu AZ31b został zaimplementowany w sformułowaniu zależnym od skali czasu. Używane jest prawo umocnienia Voce, opisane w sekcji 2.3.

W celu zastosowania niejawnego schematu całkowania Eulera równania konstytutywne zostały zapisane przyrostowo. Równanie ewolucji plastycznego gradientu deformacji:

$$\dot{\mathbf{F}}_p = \hat{\mathbf{L}}_p \mathbf{F}_p, \quad (5.1)$$

jest całkowane z użyciem funkcji eksponencjalnej argumentu tensorowego  $\Delta t \hat{\mathbf{L}}_p$ :

$$\mathbf{F}_p(t + \Delta t) = \exp(\Delta t \hat{\mathbf{L}}_p) \mathbf{F}_p(t). \quad (5.2)$$



Ponadto, używana jest metoda F-bar dla elementów sześciściennych (Souza Neto et al., 1996). Użycie metody zapewnia stabilność implementacji pozwalającą modelować niemal nieściśliwe zachowanie materiału w zakresie geometrycznie nieliniowym.

Istotnym problemem jest odpowiednia implementacja procedury reorientacji. Reorientacja sieci krystalicznej na skutek bliźniakowania ma bardzo istotny wpływ zarówno na rozwój tekstury, jak i na odpowiedź mechaniczną materiału, dlatego nie można jej pominąć. W używanej implementacji zdecydowano się modelować reorientację podobnie, jak w modelu dwu- i trójskalowym, tzn. po spełnieniu odpowiedniego warunku sieć w danym punkcie całkowania ulega reorientacji.

Zaimplementowano dwie szczególne postaci warunku reorientacji: oryginalny schemat PTVC w wersji opartej o przyrost zakumulowanego bliźniakowania opisany w Kowalczyk-Gajewska (2013) oraz jego modyfikację. W wersji oryginalnej, podobnie jak w schemacie PTVC, warunek reorientacji jest spełniony, jeżeli przyrost zakumulowanego bliźniakowania  $\Delta\Gamma_t = f_t^{TW} - f_{tp}^{TW}$  na danym kroku czasowym jest większy niż liczba  $\xi$  losowana z przedziału  $(0, \psi_{val})$ .  $f_t^{TW}$  i  $f_{tp}^{TW}$  to odpowiednio wartość zakumulowanego bliźniakowania w bieżącym i poprzednim kroku czasowym, zaś

$$\psi_{val} = 1 - f_{tp}^{TW}. \quad (5.3)$$

W drugim zaimplementowanym wariantcie warunku reorientacji zamiast  $\Delta\Gamma_t$  występuje jego zmodyfikowana wartość, a mianowicie

$$\Delta\tilde{\Gamma}_t = \frac{1}{1 + e^{-\frac{f_t^{TW} - 0,5}{0,05}}} - \frac{1}{1 + e^{-\frac{f_{tp}^{TW} - 0,5}{0,05}}}, \quad (5.4)$$

natomiast górna granica przedziału, z którego losowane jest  $\xi$  jest równa:

$$\tilde{\psi}_{val} = 1 - \frac{1}{1 + e^{-\frac{f_{tp}^{TW} - 0,5}{0,05}}}. \quad (5.5)$$

W pierwszym wariantcie zapewniona jest zgodność zakumulowanego bliźniakowania  $f^{TW}$  liczonego przez dzielenie ścinania na systemach bliźniakowania, traktowanego jako pseudo-poślizg, przez charakterystyczne ścinanie od bliźniakowania  $\gamma_{TW}$  z udziałem objętościowym zreorientowanych punktów całkowania. W wariantcie drugim, jeżeli aktualna wartość  $f_t^{TW}$  jest mniejsza niż 0,5 prawdopodobieństwo reorientacji jest mniejsze, a po przekroczeniu tej wartości większe, niż aktualna wartość  $f^{TW}$  (zobacz np. wykresy 5.33b). Drugi wariant był motywowany pracami innych badaczy, w których w implementacji MES wykorzystywany jest w tym kontekście schemat PTR (Tomé et al., 1991) z pewną krytyczną niezerową wartością  $f^{TW}$  dla której rozpoczyna się reorientacja. Na przykład, w pracy (Hama et al., 2016) dotyczącej stopu magnezu AZ31b wartość tę przyjęto jako równą 0,3.

W większości prezentowanych symulacji wykorzystywany był zmodyfikowany schemat reorientacji. W związku z tym na wykresach przedstawiane będzie zarówno zakumulowane bliźniakowanie liczone na podstawie ścinania, jak i udział objętościowy zreorientowanych fragmentów. W procedurze zadano również warunek, że jeżeli zakumulowany udział objętościowy bliźniaków  $\Gamma_t$  w danym punkcie całkowania przekroczy wartość krytyczną (równą dla stopu AZ31b 0,95), to bliźniakowanie dalej nie zachodzi. W przypadku zmiany drogi deformacji, np. kolejnego ściskania i rozciągania walcowanej blachy o wstępnej teksturze bazalnej, może nastąpić odbliźniaczenie, to jest kurczenie się i zanikanie powstałych bliźniaków. W takim wypadku reorientacja sieci zachodzi w odwrotnym kierunku niż w przypadku uprzedniego bliźniakowania. W celu umożliwienia zachodzenia bliźniakowania w modelu CPFEM wykonano sztuczne zerowanie udziałów objętościowych

zakumulowanego bliźniakowania liczonych na podstawie ścinania i ilości zreorientowanych punktów całkowania po zmianie drogi deformacji.

Implementacja CPFEM została wykonana w programie AceGen, służącym do automatycznej generacji kodu. Program łączy możliwości symboliczne programu Wolfram Mathematica z technikami automatycznego różniczkowania i zaawansowanej optymalizacji kodu (Korelc, 2002). Symulacje zostały wykonane w programie AceFEM przy użyciu ośmiowęzłowych elementów sześciennych.

### 5.1.1 Misorientacje i nowe ziarna

Bieżyący kąt misorientacji  $\delta\psi^{m,n}(t)$  był obliczany analogicznie, jak w modelu 3SCP, z tym że misorientacje były liczone między sąsiednimi elementami  $m$  i  $n$ . Ponieważ każdemu punktowi całkowania jest przypisana orientacja krystalograficzna, możliwe jest również liczenie misorientacji między sąsiednimi punktami całkowania. W przypadku materiału o sieci A1, macierz orientacji  $\mathbf{Q}(t)$  w danym punkcie jest obliczana na podstawie kierunku sieciowego [100], normalnej do płaszczyzny krystalograficznej (001) i iloczynu wektorowego obu wielkości. Powyższe wektory były obliczane przez transformację kierunków i płaszczyzn krystalograficznych do konfiguracji aktualnej:

$$\mathbf{m}(t) = \mathbf{F}_e(t)\mathbf{m}_0, \quad \mathbf{n}(t) = \mathbf{F}_e^{-T}(t)\mathbf{n}_0. \quad (5.6)$$

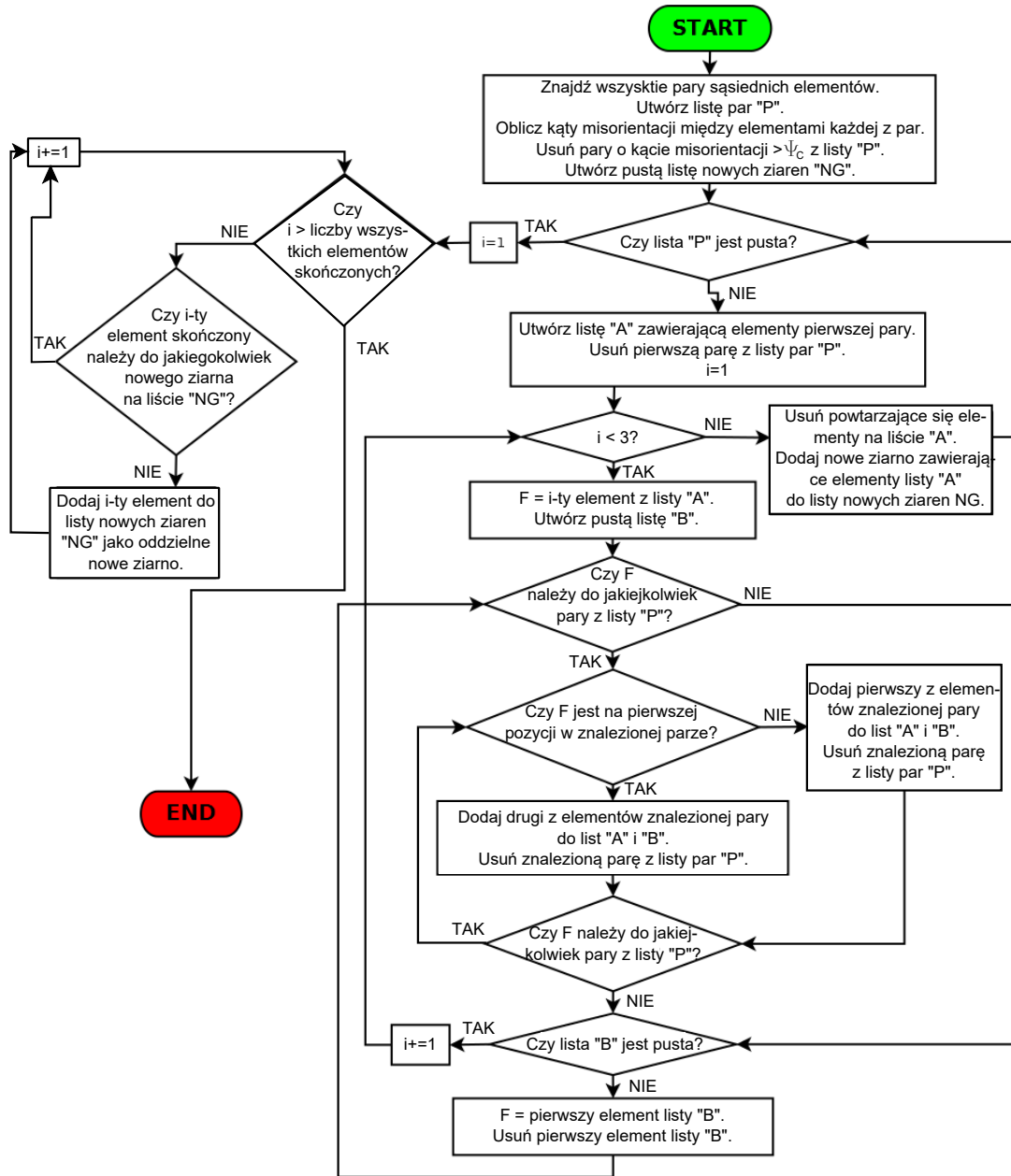
Orientacja danego elementu skończonego (ES) była obliczana jako orientacja średnia dla ośmiu punktów całkowania w sposób analogiczny do obliczania średniej orientacji w metaziarnie (równanie 4.10).

Podobnie jak w innych publikacjach, np. (Tóth et al., 2010b), dany obszar był traktowany jako nowe ziarno gdy kąt misorientacji między tym obszarem a obszarami sąsiednimi był większy niż  $\Psi_c = 5^\circ$ . Oczywiście, możliwy jest również wybór innej wartości kąta. Wpływ przyjętej wartości kąta granicznego na otrzymane rezultaty zostanie przedyskutowany w sekcji 5.2.2. Schemat blokowy pokazany na Rys. 5.1 przedstawia procedurę opracowaną w celu wyznaczenia nowych ziaren. W ramach procedury najpierw poszukiwane są wszystkie pary elementów mające wspólną ścianę. W tym celu sprawdzane są odległości między środkami elementów w konfiguracji odniesienia. Odległości te muszą być równe rozmiarowi elementu. Znalezione pary są dodawane do listy par sąsiadów „P”. Następnie obliczane są kąty misorientacji między elementami każdej z par. Gdy kąt dla danej pary jest większy niż  $\Psi_c$ , para ta jest usuwana z listy par „P”. W kolejnym kroku tworzona jest nowa, pusta lista służąca do przechowywania elementów należących do nowego ziarna. Kolejno sprawdzane są wszystkie pary o kącie misorientacji mniejszym niż  $\Psi_c$ . Elementy o kątach misorientacji między sobą mniejszych od  $5^\circ$  są dodawane do podlist, które są później dodawane do listy „NG”. W ten sposób powstaje zagnieżdżona lista zawierająca zbiory elementów należących do nowych ziaren. Na koniec do listy jako jednoelementowe zbiory dodawane są elementy, które miały większe niż  $\Psi_c$  kąty misorientacji ze wszystkimi sąsiadami. Każdy z ostatniej grupy elementów stanowi oddzielne nowe ziarno.

W celu analizy wyników symulacji obliczane były również kąty misorientacji między nowymi ziarnami. Procedura była analogiczna, jak w przypadku obliczania kątów misorientacji między sąsiednimi ES: dla każdego nowego ziarna obliczana była orientacja średnia, a następnie macierz i kąt misorientacji dla danej pary nowych ziaren.

### 5.1.2 Współczynniki Taylora

W celu analizy wyników symulacji rozwoju mikrostruktury materiału o sieci A1 deformowanego w procesie ECAP używano współczynników Taylora, których zadaniem była ocena łatwości



Rysunek 5.1: Schemat blokowy przedstawiający procedurę wyznaczania nowych ziaren.

z jaką dane ziarno ulega deformacji. Im wyższa wartość współczynnika Taylora dla ziarna, tym wyższe naprężenie jest wymagane, aby uległo ono deformacji. Współczynniki Taylora zostały policzone jako stosunek naprężenia Hubera-Misesa-Hencky'ego (HMH)  $\sigma_{HMH}$  do CRSS  $\tau_c$ :

$$M = \frac{\sigma_{HMH}}{\tau_c}, \quad \sigma_{HMH} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}}, \quad (5.7)$$

gdzie  $\mathbf{S}$  jest dewiatorem naprężenia Cauchy'ego. Dla uproszczenia, w celu obliczenia współczynników Taylora symulacje zostały wykonane bez umocnienia – wartość  $\tau_c$  była równa początkowej wartości  $\tau_c = 10$  MPa i taka sama dla wszystkich systemów.

Naprężenie Cauchy'ego dla każdego ziarna  $k$  było liczone na podstawie pierwszego naprężenia Pioli-Kirchhoffa  $\mathbf{S}^k$  i gradientu deformacji  $\bar{\mathbf{F}}^k$  uśrednionych po objętości ziarna w konfiguracji odniesienia:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^k = \frac{1}{\det \bar{\mathbf{F}}^k} (\mathbf{S}^k \bar{\mathbf{F}}^{kT}), \quad (5.8)$$

gdzie uśrednione wielkości zostały policzone według wzorów:

$$\bar{\mathbf{S}}^k = \frac{\sum_i w_i \mathbf{K}}{\sum_i w_i}, \quad \bar{\mathbf{F}}^k = \frac{\sum_i w_i \mathbf{F}}{\sum_i w_i}, \quad (5.9)$$

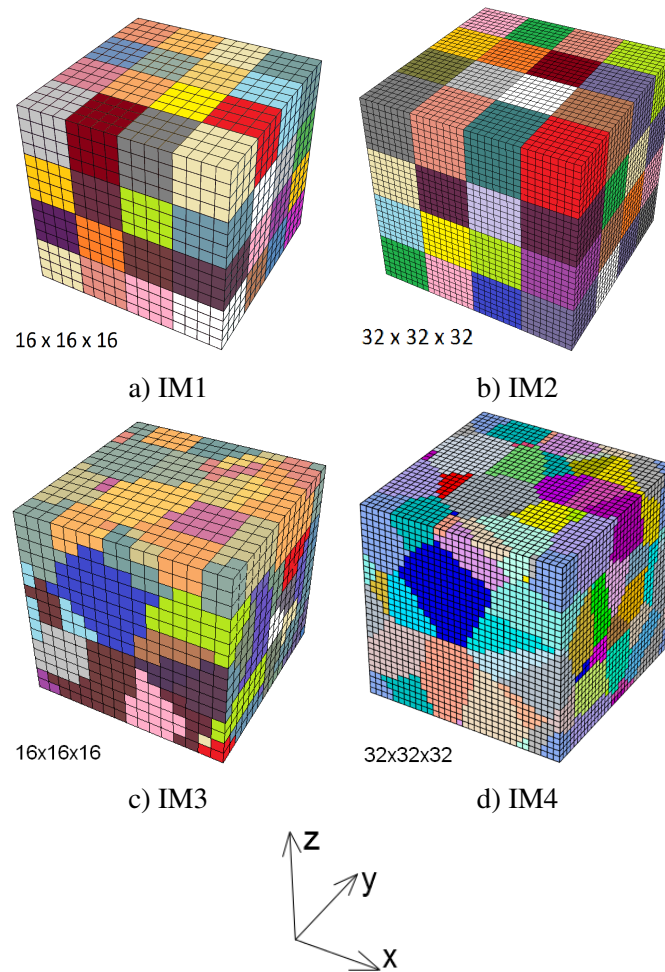
a  $w_i$  są wagami Gaussa w punktach całkowania należących do ziarna  $k$ .

## 5.2 Modelowanie rozwoju mikrostruktury w procesie ECAP dla materiału o sieci A1

W celu analizy rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w materiale o sieci A1 wykonano symulacje procesu ECAP. Deformacja plastyczna materiału mogła zachodzić przez poślizg na 12 systemach  $\{111\} \langle 110 \rangle$ . Analogicznie do podejścia używanego w modelu dwu- i trójskalowym, pojedyncze przejście przez kanał było modelowane jako proste ścinanie. W celu analizy niejednorodności odkształcenia wewnątrz ziaren, każde ziarno reprezentowane było przez kilkadziesiąt-kilkaset elementów sześciociennych. Symulacje zostały przeprowadzone dla czterech różnych idealizacji mikrostruktury (IM), por. Rys. 5.2. Każda z dwóch pierwszych idealizacji składa się z 64 sześciennych ziaren. Każdemu z ziaren przypisano inną, losowo wybraną orientację. Każde z ziaren zostało podzielone na 64 (IM1, Rys. 5.2a) lub 512 (IM2, Rys. 5.2b) elementów skończonych (ES). Dwie pozostałe idealizacje zostały otrzymane dla teselacji Woronoja. Generacja periodycznej teselacji, jak również rzadkiej i gęstej siatki (odpowiednio dla IM3 i IM4, por Rys. 5.2c i d) zostały wykonane w programie Neper (Quey et al., 2011). IM3 została podzielona na  $19 \times 19 \times 19 = 6859$ , natomiast IM4 na  $37 \times 37 \times 37 = 50653$  ES.

Zastosowano mikro-periodyczne warunki brzegowe opisane w sekcji 5.3.1 i przedstawione za pomocą wzoru 5.12.  $\bar{\mathbf{F}}$  jest obróconym gradientem deformacji dla prostego ścinania (por., np. (Beyerlein i Tóth, 2009), kąt kanału w modelowanym procesie wynosi  $\pi/2$ ), a  $\mathbf{u}_A$  i  $\mathbf{u}_B$  są wektorami przemieszczeń na przeciwległych ścianach sześciennego elementu objętości. Komponenty gradientu  $\bar{\mathbf{F}}$  w układzie współrzędnych  $\{x, y, z\}$  (jak na Rys. 5.2) są równe:

$$\bar{F}_{ij} = \begin{bmatrix} 2 + \cos \frac{\pi}{2} & 0 & -\sin \frac{\pi}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{(\cos \frac{\pi}{2} + 1)^2}{\sin \frac{\pi}{2}} & 0 & -\cos \frac{\pi}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

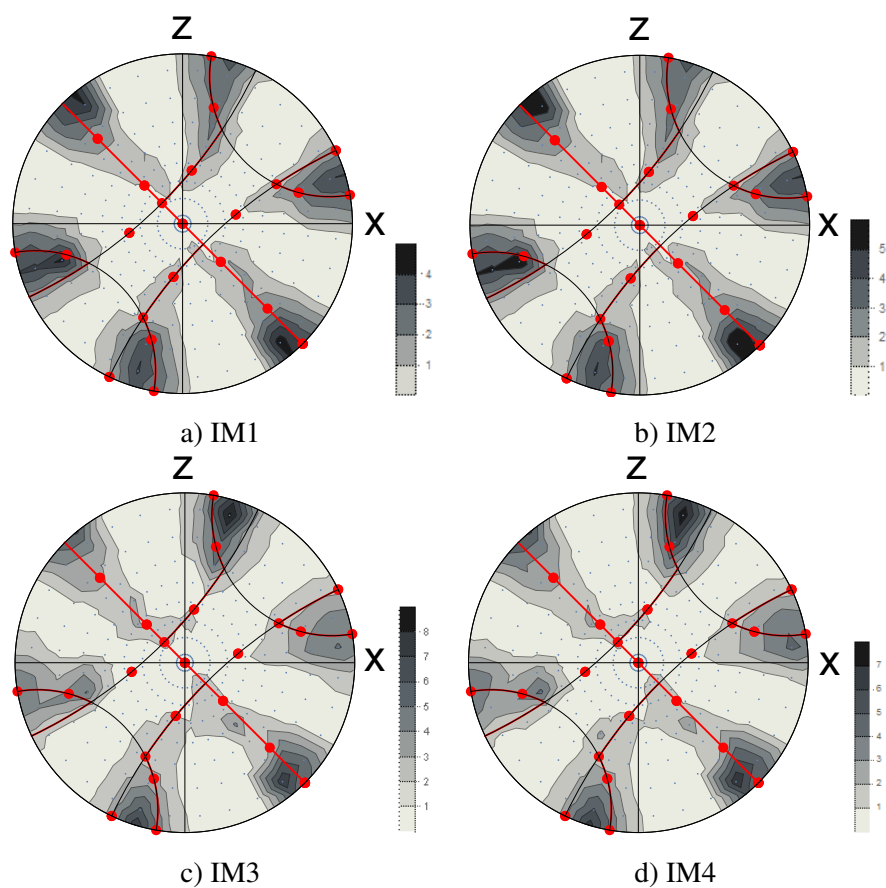


Rysunek 5.2: Cztery idealizacje mikrostruktury używane w symulacjach procesu ECAP dla materiału o sieci A1: a) IM1: 64 sześciennie ziarna, każde podzielone na 64 ES, b) IM2: 64 sześciennie ziarna, każde podzielone na 512 ES, c) IM3: 64 nieregularne ziarna, całość podzielona na 19<sup>3</sup> ES i d) IM4: 64 nieregularne ziarna, całość podzielona na 37<sup>3</sup> ES.

### 5.2.1 Tekstura

Rys. 5.3 przedstawia figury biegunowe  $\{111\}$  otrzymane dla symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy. Uzyskane tekstury są podobne do tekstur uzyskanych w sposób doświadczalny, por. np. Rys. 7. w pracy (Beyerlein i Tóth, 2009). Tekstury uzyskane dla różnych gęstości siatki nie różnią się zbyt od siebie. Z drugiej strony, tekstury policzone przy zastosowaniu teselacji Woronoja w niewielkim stopniu różnią się od tych będących wynikiem symulacji z użyciem ziaren sześciennych. Może to być skutkiem innych kształtów ziaren i innych otoczeń ziaren w obu przypadkach. Różnica nie wynika natomiast z wrażliwości na wstępną teksturę, ponieważ w każdym przypadku obliczenia zostały wykonane dla tego samego zestawu wstępnych orientacji.

Uzyskane tekstury były również analizowane w sposób ilościowy poprzez liczenie wartości funkcji rozkładu orientacji dla obróconych komponentów idealnej tekstury prostego ścinania. Zauważono, że wartości komponentów dla tekstury uzyskanej przy użyciu modelu CPFEM są niższe niż analogiczne wartości uzyskane przy użyciu modeli mikromechanicznych, por. (Frydrych i Kowalczyk-Gajewska, 2016). Uzyskane wartości nie zostały przedstawione w rozprawie, ponie-



Rysunek 5.3: Figury biegunowe  $\{111\}$  policzone na podstawie tekstury uzyskanej w symulacjach jednego przejścia przez kanał kątowy dla materiału o sieci A1 i idealizacji mikrostruktury a) IM1, b) IM2, c) IM3 oraz d) IM4. Czerwone linie i punkty oznaczają orientacje idealne dla materiału o sieci A1 deformowanego w procesie ECAP o kącie kanału  $90^\circ$  wyznaczone za pomocą modelu prostego ścinania przez Li et al. (2005).

waż są one silnie wrażliwe zarówno na wybór wstępnego zestawu 64 orientacji, jak również ich przestrzenne rozmieszczenie.

### 5.2.2 Nowe ziarna

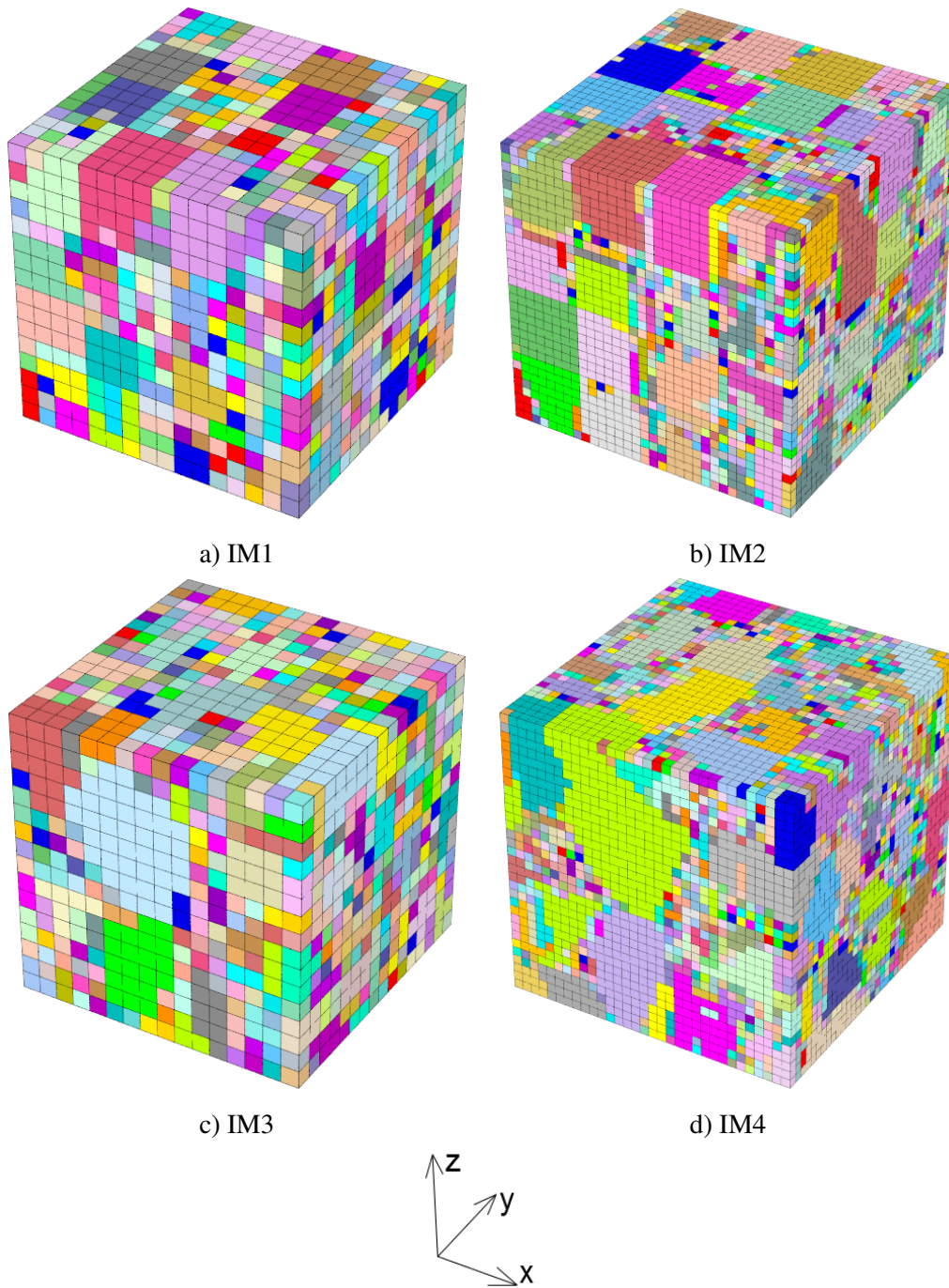
Nowe ziarna (zbiory elementów mające kąty misorientacji z sąsiednimi do zbioru elementami większe niż  $\Psi_c = 5^\circ$ ) przedstawiono na Rys. 5.4 na konfiguracji odniesienia. Można zauważyć (szczególnie w przypadku bardziej gęstych siatek), że nowe ziarna mają tendencję do powstawania blisko początkowych granic ziaren. Ponadto, niektóre ziarna wydają się nie być podzielone wcale, podczas gdy inne są podzielone do tego stopnia, że niemal każdy ES stanowi nowe ziarno. Rys. 5.5 przedstawia mapy zakumulowanego ścinania na konfiguracji odniesienia uzyskane w symulacjach dla idealizacji IM2 i IM4. Porównując mapy na Rys. 5.5 a i b z obrazem nowych ziaren na Rys. 5.4b i d można stwierdzić, że wiele nowych ziaren powstaje na styku obszarów ulegających różnym wielkościom ścinania.

Chociaż wartość  $\Psi_c = 5^\circ$  była używana w innych pracach (por. np. (Tóth et al., 2010b)) i jest to kąt domyślnie używany do wyznaczania granic ziaren w analizie EBSD, nie stanowi ona jedyne­go możliwego wyboru. Oczywistym jest, że wartość kąta ma ogromny wpływ na wyznaczenie nowych ziaren. Rys. 5.6 przedstawia mapy nowych ziaren (naniesione na konfigurację odniesienia) otrzymane dla różnych wartości kąta  $\Psi_c$ , mianowicie: a) 3, b) 7, c) 10 i d)  $15^\circ$ . Można łatwo zauważyć, że użycie kąta  $\Psi_c = 3^\circ$  skutkuje przewidywaniem silnego rozdrobnienia mikrostruktury, natomiast dla  $\Psi_c = 7^\circ$ , nowych ziaren jest znacznie mniej. Wybór  $\Psi_c = 10^\circ$  lub  $15^\circ$  powoduje, że na mapach jest jeszcze mniej nowych ziaren. Ponadto, w tych przypadkach nastąpiło nawet połączenie niektórych początkowych ziaren w jedno nowe ziarno. Mając na uwadze powyższą analizę uznano, że wartość kąta  $\Psi_c = 5^\circ$  jest optymalna, ponieważ pozwala na analizę powodów, dla których rozdrobnienie ziaren występuje w jednym regionie a nie występuje w innym. Dla pozostałych wartości kąta albo wszystkie ziarna były mocno podzielone, albo przewidywanych było bardzo mało nowych ziaren.

W pracach (Wu et al., 2006) i (Chun et al., 2005) w celu wyznaczenia granic wysokiego kąta używano wartości odpowiednio  $11^\circ$  i  $15^\circ$ . Z wyżej opisanych powodów zastosowanie takich wartości w niniejszym rozdziale nie miało sensu. Na Rys. 5.15 można zauważyć, że w żadnym przypadku kąt misorientacji między początkowymi ziarnami nie był niższy niż  $15^\circ$ . Połączenie tej obserwacji z faktem, że zdeformowane ziarna mają w wielu przypadkach między sobą misorientacje niższe niż  $10^\circ$  (por. Rys. 5.6c) pozwala wysnuć wniosek, że misorientacje między ziarnami maleją. Powodem zbliżania się orientacji ziaren do siebie może być rozwój tekstury, w tym przypadku dążenie orientacji ziaren do idealnych orientacji dla jednego przejścia przez kanał ECAP, czyli do obróconej tekstury ścinania.

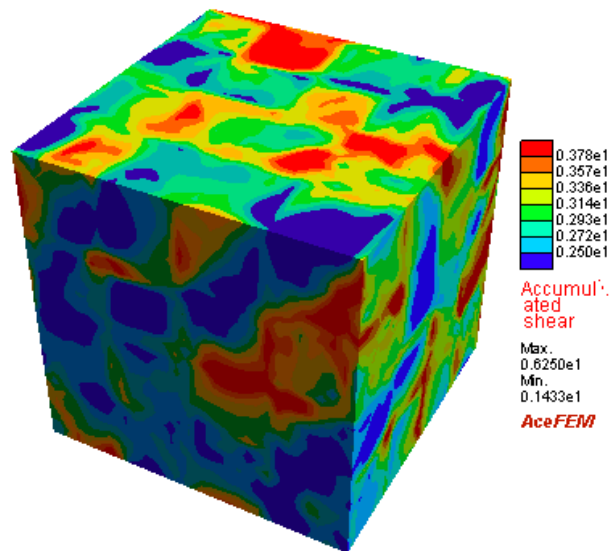
### 5.2.3 Rozkłady kątów misorientacji

Rys. 5.7 przedstawia rozkłady kątów misorientacji dla każdej z czterech idealizacji. Rozkłady w lewej kolumnie uzyskano dla misorientacji dla każdej pary elementów mających wspólną ścianę, por. Rys. 5.8a, natomiast rozkłady w kolumnie prawej dla par sąsiednich nowych ziaren pokazanych na Rys. 5.4. Nowe ziarna były traktowane jako sąsiadujące, jeżeli miały ze sobą co najmniej jedną wspólną ścianę między elementami skończonymi, por. Rys. 5.8b. Niezależnie od tego, czy liczba wspólnych ścian wynosiła jeden, czy była większa, kąt misorientacji dla danej pary nowych ziaren był obliczany tylko raz, por. Rys. 5.8c. Na rozkładach widoczne są dwa lokalne maksima: wyższe dla małych kątów i niższe dla kątów w okolicach  $45^\circ$ . Wyniki te są jakościowo zgodne z rozkładami przedstawionymi na Rys. 4a w pracy Tóth et al. (2010a). Autorzy mierzyli kąty misorientacji między

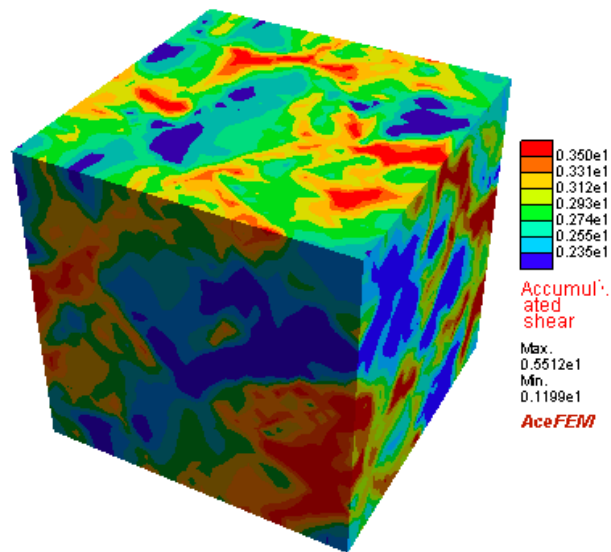


Rysunek 5.4: Nowe ziarna wyznaczone z warunku kąta misorientacji większego niż  $5^\circ$  pokazane dla czterech reprezentacji mikrostruktury. W celu ułatwienia porównania ze stanem początkowym, mapy zostały pokazane na konfiguracji odniesienia. Rysunki zostały wykonane w programie Neper (Quey et al., 2011).

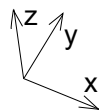




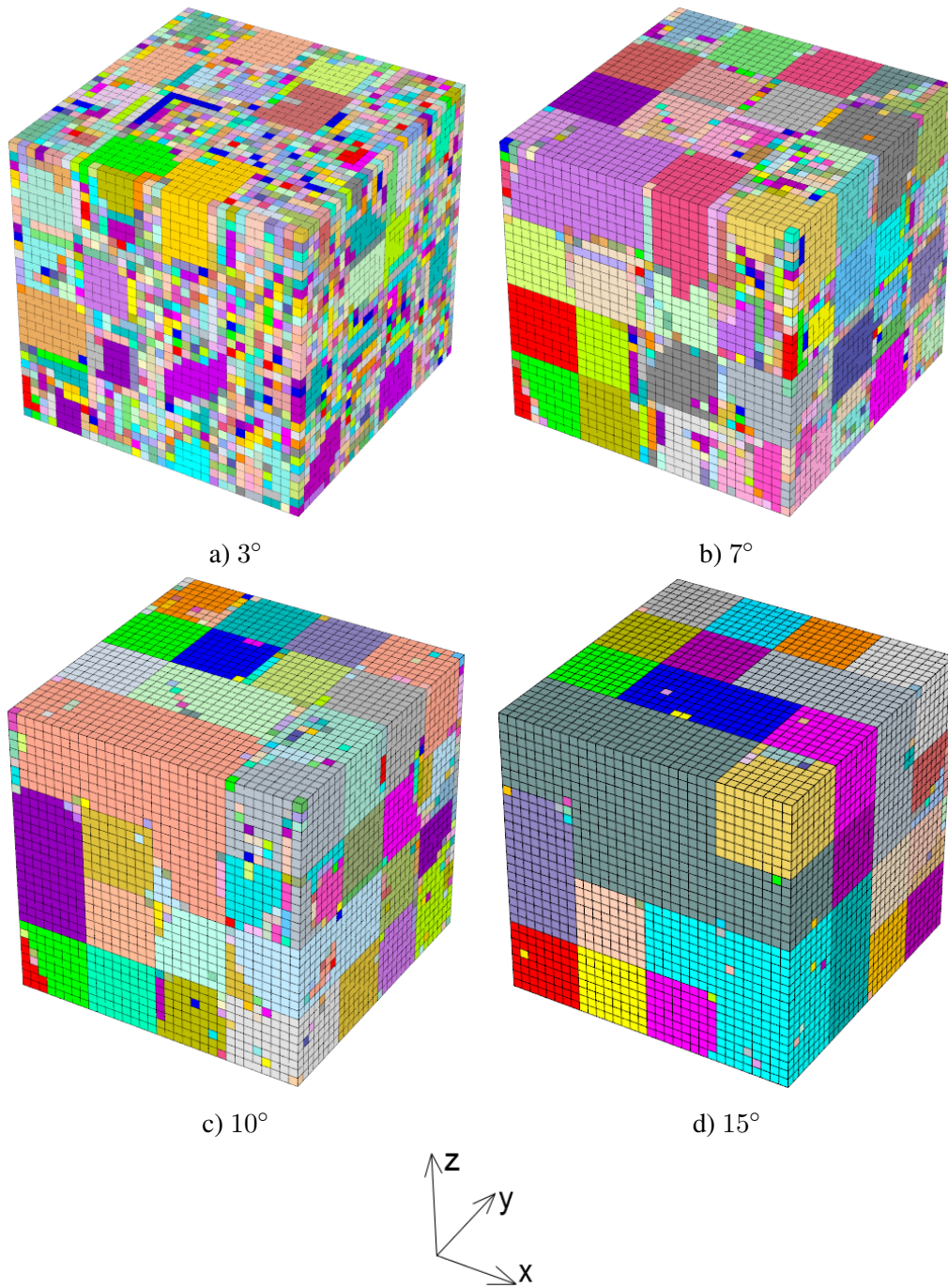
a) IM2



b) IM4



Rysunek 5.5: Mapy zakumulowanego plastycznego ścinania  $\gamma$  na konfiguracji odniesienia dla a) IM2 i b) IM4.



Rysunek 5.6: Mapy nowych ziaren naniesione na konfiguracji nieodkształconej, wyznaczone dla zdeformowanej mikrostruktury IM2 i kąta  $\Psi_c$  równego: a)  $3^\circ$ , b)  $7^\circ$ , c)  $10^\circ$  i d)  $15^\circ$ . Rysunki zostały wykonane przy użyciu programu Neper (Quey et al., 2011).

nowo-powstałymi sąsiednimi ziarnami, dlatego wyniki eksperymentu stanowią bazę do porównania dla wyników symulacji przedstawionych w prawej kolumnie Rys. 5.7.

Jak widać, w przypadku gęstych siatek (Rys. 5.7 b i d) udziały dużych kątów są mniejsze niż w przypadku siatek rzadkich (Rys. 5.7 a i c). Obserwacja ta jest łatwa do wyjaśnienia, jeśli przyjrzemy się liczbie  $\kappa$  zdefiniowanej jako liczba kątów misorientacji między obszarami (odpowiednio elementami lub nowymi ziarnami) należącymi do różnych początkowych ziaren  $N_{bou}$  podzielona przez liczbę kątów misorientacji między obszarami (ponownie, odpowiednio elementami lub nowymi ziarnami) należącymi do jednego początkowego ziarna  $N_{int}$ . Wysokie wartości  $\kappa$  oznaczają znaczny udział kątów misorientacji między obszarami należącymi do różnych początkowych ziaren. Kąty te są wysokie, ponieważ początkowe ziarna mają orientacje rozłożone losowo w przestrzeni orientacji. Z tego powodu dla wysokich wartości  $\kappa$  udział dużych kątów jest wyższy niż dla wartości niskich.

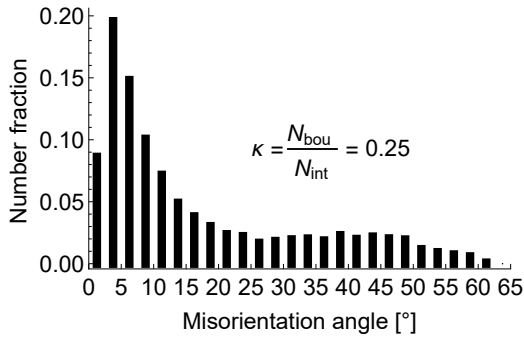
Podsumowując, różne idealizacje mikrostruktury (ziarna w kształcie sześciątów lub teselacje Woronoja) prowadzą do podobnych rozkładów kątów misorientacji. Rodzaj idealizacji wpływa na kształt rozkładu przede wszystkim poprzez stosunek liczby połączeń w strefie granic początkowych ziaren do liczby połączeń w ich wnętrzach. Jest to dobrze widoczne, gdy porównamy Rys. 5.7 a i d. Odpowiednie idealizacje mają inne kształty ziaren i liczbę ES. Ponadto w przypadku ziaren sześciennych początkowe granice są płaskie, podczas gdy granice między ziarnami uzyskanymi dla teselacji Woronoja są ząbkowane. Wartości  $\kappa$  w obu przypadkach są jednak zbliżone, co skutkuje podobnym poziomem dwóch lokalnych maksimum w obu przypadkach.

W celu dokładniejszego zbadania pochodzenia obu maksimum obecnych w rozkładach kątów misorientacji na Rys. 5.7 zdecydowano się rozdzielić rozkłady misorientacji w sposób podobny jak w pracy (Tóth et al., 2010a). Kąty misorientacji podzielono na te leżące w strefie granic początkowych ziaren oraz te wewnątrz początkowych ziaren. W przypadku misorientacji między sąsiednimi ES, za strefę granic ziaren uznano warstwę o grubości jednego ES pod brzegiem każdego sześciennego ziarna. Pozostałe elementy należały do drugiej grupy. W przypadku misorientacji między sąsiednimi nowymi ziarnami, dane nowe ziarno było zaliczane do strefy granic początkowych ziaren, jeśli miało co najmniej jedną wspólną ścianę z elementem należącym do innego początkowego ziarna niż to, w którym samo było. Otrzymane w ten sposób rozdzielone rozkłady kątów misorientacji otrzymane dla symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy przedstawia Rys. 5.9a. Można zauważyć, że dla kątów grupy pierwszej (strefa początkowych granic) udział dużych kątów jest zdecydowanie większy niż dla grupy drugiej. Rys. 5.9b przedstawia wyniki analogiczne do wyników z Rys. 5.9a, ale tym razem z analizy zostały wykluczone kąty misorientacji między obszarami należącymi do różnych początkowych ziaren. W skład grupy pierwszej wchodzi więc teraz tylko kąty między elementami lub nowymi ziarnami leżącymi wprawdzie w pobliżu początkowej granicy, ale należącymi do tego samego początkowego ziarna. Porównując rysunki 5.9a i 5.9b można stwierdzić, że obecność maksimum dla dużych kątów jest skutkiem wliczania do rozkładu kątów misorientacji kątów między obszarami należącymi do różnych początkowych ziaren, a więc o misorientacjach rozłożonych losowo. Z drugiej strony można również zauważyć, że nawet na Rys. 5.9b kąty misorientacji w strefie początkowych granic są nieco wyższe niż kąty pozostałe, co w sposób pośredni pokazuje, że wg modelu kontynualnego w pobliżu granic ziaren rozdrobnienie zachodzi szybciej.

#### 5.2.4 Sformułowanie zależne od skali czasu

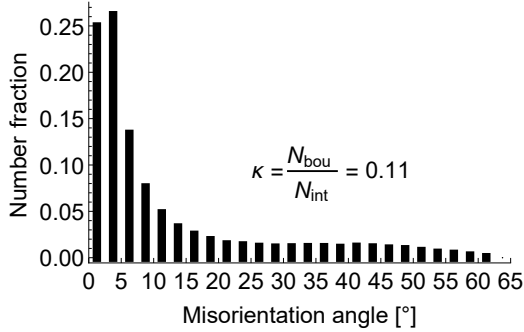
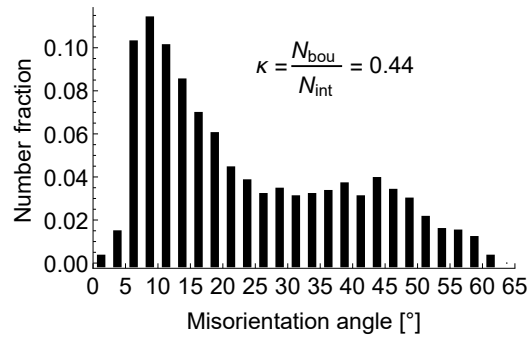
Wszystkie powyższe wyniki otrzymano używając sformułowania niezależnego od skali czasu dla  $n = 8$ . Można je porównać z wynikami uzyskanymi dla sformułowania zależnego od skali czasu dla  $\bar{n} = 2n - 1 = 15$ . W celu uzasadnienia wyboru wartości  $n$ , obliczenia przeprowadzono

Rozkład kątów misorientacji między sąsiednimi:  
elementami

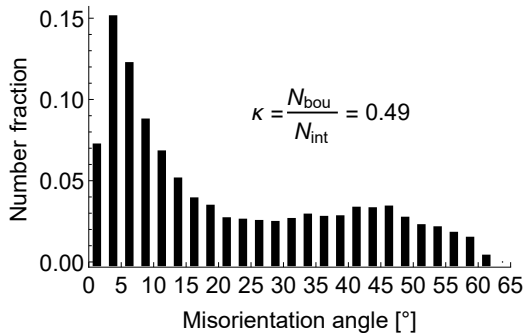
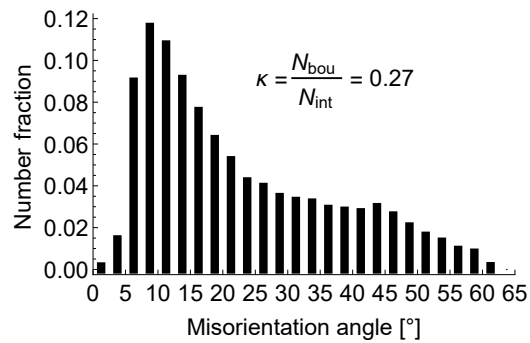


a)

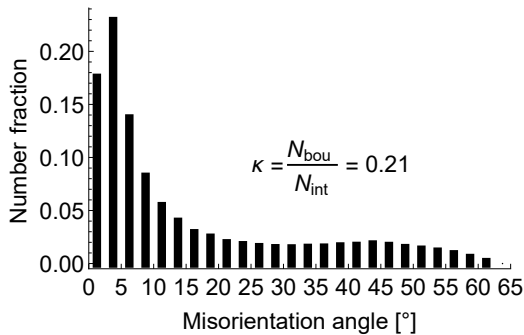
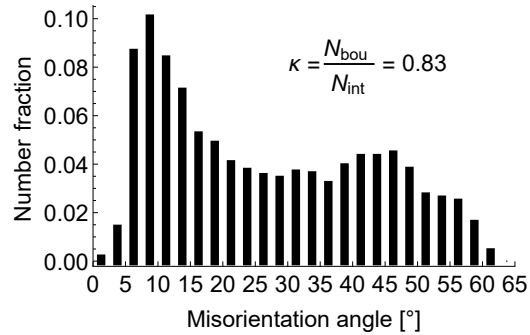
nowymi ziarnami



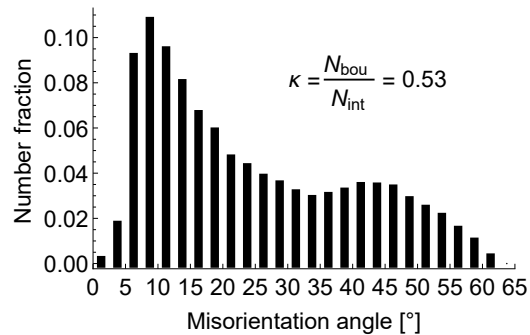
b)



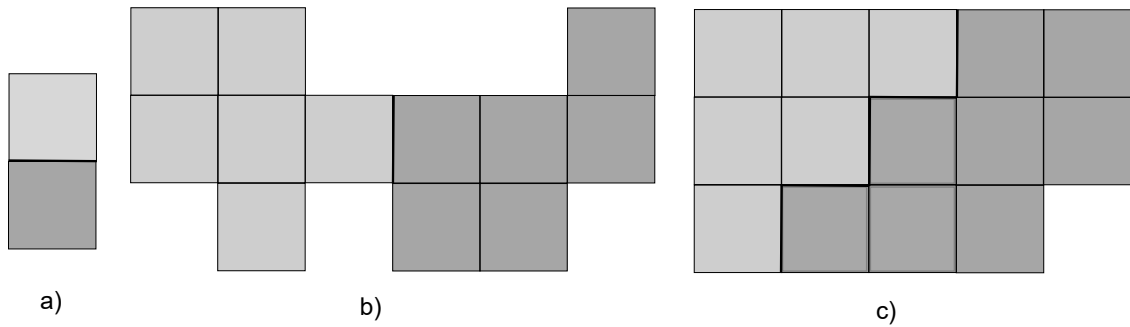
c)



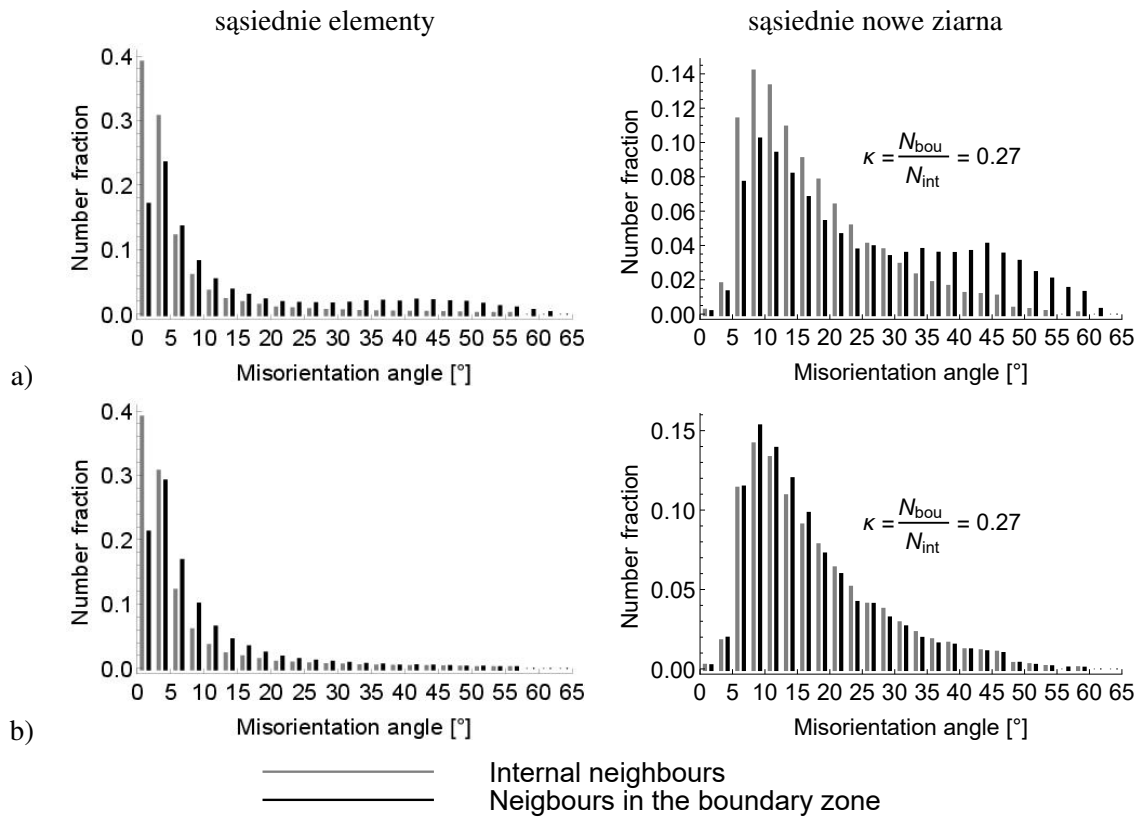
d)



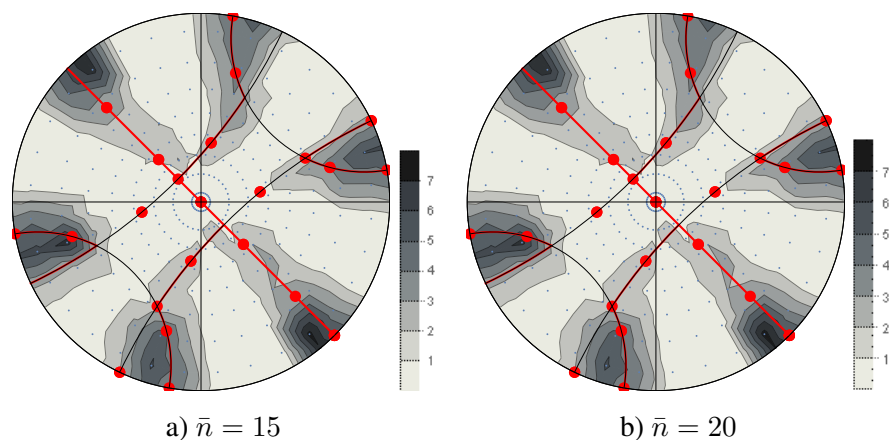
Rysunek 5.7: Rozkłady kątów misorientacji między sąsiednimi elementami (lewa kolumna) i sąsiednimi nowymi ziarnami (prawa kolumna) otrzymane dla czterech idealizacji mikrostruktury.



Rysunek 5.8: Schemat ukazujący które kąty misorientacji były obliczane w celu narysowania rozkładów kątów misorientacji między sąsiednimi elementami i nowymi ziarnami. a) Dwa ES były traktowane jako sąsiednie w przypadku gdy miały wspólną ścianę. b) Dwa nowe ziarna były traktowane jako sąsiednie, jeśli należące do nich elementy miały co najmniej jedną wspólną ścianę. c) Również w przypadku gdy elementy należące do dwóch nowych ziaren miały wiele wspólnych ścian, do rozkładu kątów brana była pod uwagę tylko jedna misorientacja.



Rysunek 5.9: Rozdzielone rozkłady kątów misorientacji uzyskane w symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy dla idealizacji IM2 (64 sześciennne ziarna, każde podzielone na 512 ES) w przypadku a) brania i b) niebrania pod uwagę kątów między obszarami należącymi do różnych początkowych ziaren. Rozkłady w lewej i prawej kolumnie zostały uzyskane dla sąsiednich ES i sąsiednich nowych ziaren.



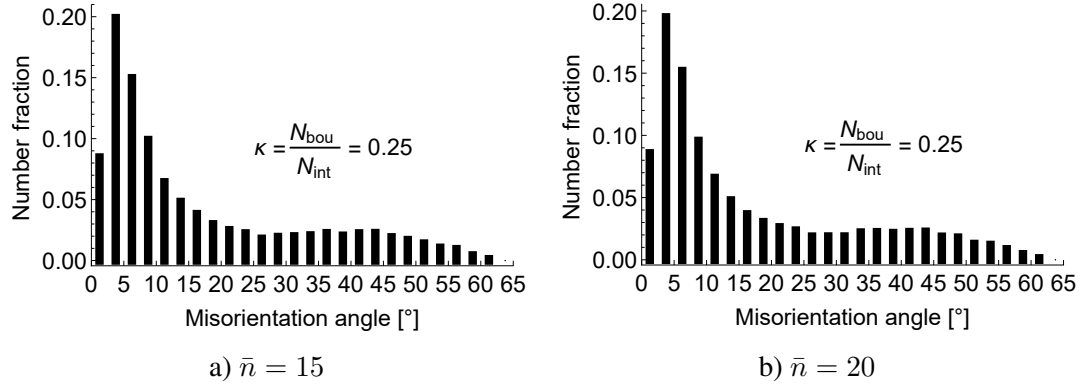
Rysunek 5.10: Figury biegunowe  $\{111\}$  policzone dla tekstury uzyskanej w symulacjach jednego przejścia przez kanał ECAP dla IM1 i sformułowania zależnego od skali czasu oraz  $\bar{n} =$  a) 15 i b) 20. Czerwone linie i kropki to orientacje idealne dla materiału o sieci A1 poddanego jednemu przejściu przez kanał procesu ECAP o kącie  $90^\circ$ , modelowanemu jako proste ścinanie (Li et al., 2005). Osie są takie same, jak na Rys. 5.3.

również dla jeszcze większej wartości  $\bar{n} = 20$ . Figury biegunowe  $\{111\}$  i rozkłady kątów misorientacji dla obu wartości  $\bar{n}$  (15 i 20) dla IM1 zostały przedstawione odpowiednio na Rys. 5.10 i 5.11. Wyniki są zgodne z przewidywaniami modelu niezależnego od skali czasu (por. 5.3a i 5.7a). Powyższa analiza pokazuje, że na przedstawione wyniki nie ma wpływu fakt przyjęcia sformułowania niezależnego od skali czasu.

### 5.2.5 Dyskusja

Zadaniem bieżącej podsekcji jest próba odpowiedzi na pytanie: co powoduje, że jedne ziarna ulegają rozdrobnieniu, a inne nie. W tym celu przedyskutowane zostaną dwie hipotezy: 1) rozdrobnieniu ulegają ziarna niekorzystnie zorientowane względem danej deformacji i 2) rozdrobnieniu ulegają obszary leżące w pobliżu granicy wysokiego kąta. Według hipotezy pierwszej trudno deformowalne ziarna ulegają rozdrobnieniu, dzięki czemu deformacja zachodzi przy działaniu niższych naprężeń. W drugim przypadku rozdrobnienie zachodziłoby w celu zachowania kompatybilności w okolicy granicy. Sąsiednie ziarna mające inną orientację odkształcają się na skutek działania różnych systemów poślizgu. W przypadku jednorodnej deformacji każdego z ziaren powodowałoby to powstawanie pustek i nakładania się materiału. Dlatego w pobliżu granicy muszą zachodzić dodatkowe deformacje. Deformacja brzegu ziarna istotnie różni się od deformacji wnętrza może prowadzić do powstawania nowych ziaren w pobliżu początkowej granicy wysokiego kąta. O ile nie zaznaczono inaczej, w celu zweryfikowania obydwu hipotez analizowano wyniki dla idealizacji IM2 (64 sześciennie ziarna, każde podzielone na 512 ES).

W celu sprawdzenia hipotezy pierwszej, policzono współczynniki Taylora dla każdego z ziaren. Współczynniki Taylora dla odkształcenia 0,1 przy różnym stopniu zagęszczenia siatki przedstawia Rys. 5.12. Wartość odkształcenia 0,1 została wybrana ponieważ uznano, że współczynniki powinny być policzone dla stanu przed rozdrobnieniem. W przypadku większych odkształceń (gdy nowe ziarna już powstały) wartości współczynników byłyby uśredniane między obszarami deformującymi się w różny sposób, co nie dawałoby odpowiedzi na pytanie o powody rozdrobnienia. Współczynniki zostały policzone w sposób przedstawiony w podsekcji 5.1.2. Dla coraz gęstszych siatek współczynniki zbiegają do wspólnych wartości.



Rysunek 5.11: Rozkłady kątów misorientacji dla wszystkich sąsiednich (mających wspólną ścianę) ES uzyskane w symulacji jednego przejścia przez kanał ECAP dla IM1 przy zastosowaniu sformułowania zależnego od skali czasu oraz  $\bar{n} =$  a) 15 i b) 20.

W celu oceny korelacji dwóch zbiorów danych obliczany był współczynnik korelacji Pearsona:

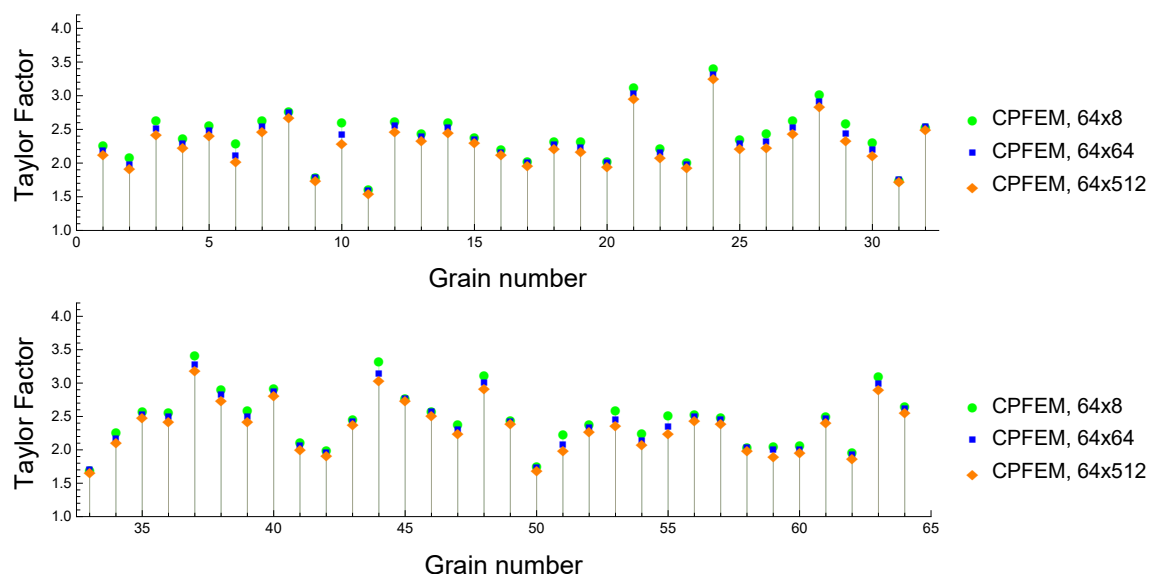
$$r = \frac{\text{cov}(x, y)}{s_x s_y} \quad (5.11)$$

gdzie  $\text{cov}(x, y)$  jest kowariancją a  $s_x, s_y$  to odchylenia standardowe dla dwóch zbiorów danych. Gdy jeden ze zbiorów zawierał wartości współczynników Taylora dla najdrobniejszej siatki (512 elementów na ziarno) a drugi dla najrzadszej (8 elementów na ziarno) lub średniej (64 elementy na ziarno), wartości  $r$  były bliskie jedności, co oznacza prawie pełną korelację, a w danym przypadku, że dwa zbiory są prawie takie same.

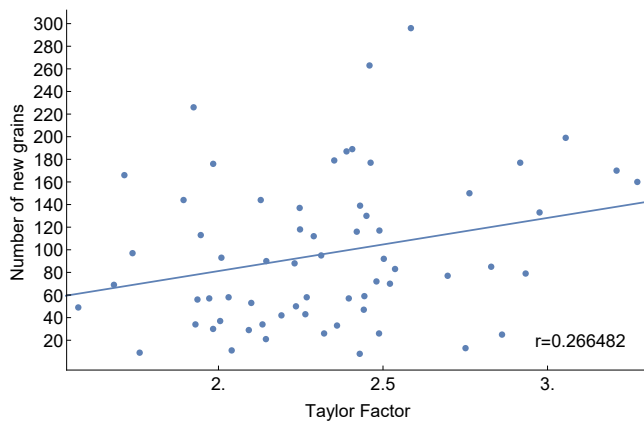
Następnie dokonano analizy korelacji współczynników Taylora i liczby powstałych nowych ziaren dla każdego z początkowych ziaren. Wyniki zestawienia dwóch zbiorów przedstawia Rys. 5.13. Jak widać, punkty są bardzo rozrzucone. Współczynnik korelacji  $r$  wynosi 0,266, co oznacza słabą, dodatnią korelację. Wyniki pokazują więc, że istnieje słaba tendencja ziaren trudno deformowalnych (o wysokim współczynniku Taylora) do ulegania większemu rozdrobieniu niż ziarna łatwo deformowalne, ale na pewno nie jest to jedyny czynnik decydujący o rozdrobieniu.

Na wartości współczynników Taylora wyznaczone w modelu CPFEM może mieć wpływ nie tylko orientacja danego ziarna, ale również orientacje ziaren sąsiednich. Pytanie, jakie nasuwa się w tym momencie brzmi: na ile uzasadnione jest używanie współczynników Taylora wyznaczonych w symulacji numerycznej do oceny wpływu orientacji ziarna na rozdrobnienie. W celu odpowiedzi na to pytanie wykonano cztery dodatkowe symulacje dla tego samego zbioru 64 orientacji, ale przypisanych w każdym przypadku innym, losowo wybranym ziarnom. W symulacjach wyznaczono współczynniki Taylora dla każdej z orientacji i porównano je ze sobą. W tym celu policzono współczynniki korelacji, których wartości okazały się być powyżej 0,8, co świadczy o bardzo wysokiej korelacji. Podsumowując, można stwierdzić, że orientacje początkowych ziaren zdecydowanie silniej wpływają na wartości współczynników Taylora niż orientacje ziaren sąsiednich. Z tego powodu współczynniki Taylora wyznaczone w modelu CPFEM mogą być używane do oceny wpływu początkowej orientacji na rozdrobnienie danego ziarna.

W celu sprawdzenia drugiej hipotezy (rozdrobnienie ziaren jest największe w pobliżu granic wysokiego kąta) zbadano zależność między średnim kątem misorientacji między sąsiednimi elementami w strefie początkowej granicy ziarna, a początkowym kątem misorientacji na tej granicy. Strefa granicy dla każdego z dwóch ziaren po obu jej stronach składała się w tym przypadku

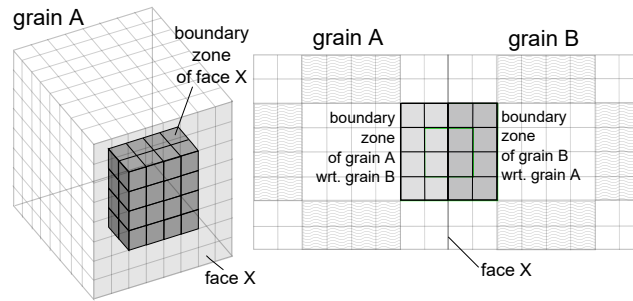


Rysunek 5.12: Współczynniki Taylora dla ziaren sześciennych dla różnych gęstości siatek.

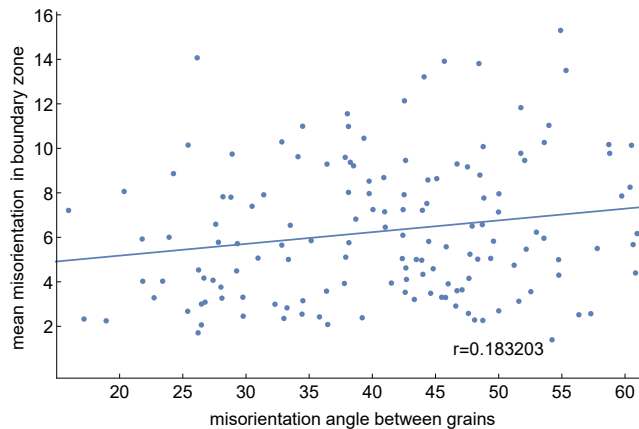


Rysunek 5.13: Zależność liczby nowych ziaren od współczynnika Taylora. Wyniki zostały otrzymane dla 64 sześciennych ziaren podzielonych na  $8 \times 8 \times 8$  elementów i odkształcenia 0,1. Prosta została dopasowana metodą najmniejszych kwadratów.  $r$  jest współczynnikiem korelacji Pearsona.





Rysunek 5.14: Schematyczny rysunek przedstawiający strefy granic ziaren używane w celu weryfikacji hipotezy 2.

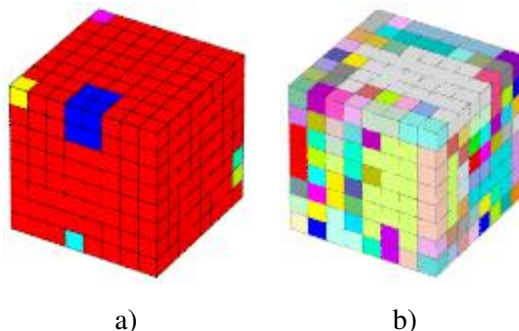


Rysunek 5.15: Zależność średniego kąta misorientacji w strefie przy początkowej granicy ziaren od początkowego kąta misorientacji na tej granicy. Prosta została otrzymana metodą najmniejszych kwadratów.  $r$  jest współczynnikiem korelacji Pearsona.

z dwóch warstw 4x4 ES na środku ściany, por. Rys. 5.14. Elementy w pobliżu krawędzi sześciennych ziaren zostały pominięte, w celu analiz wyłącznie wpływu misorientacji dwóch sąsiednich ziaren na rozdrobnienie. Średnie kąty misorientacji dla stref były liczone jako średnie arytmetyczne dla wszystkich kątów misorientacji między sąsiednimi elementami należącymi do danej strefy. Następnie strefy po obu stronach granic były łączone w pary i dla każdej z par liczony był średni kąt misorientacji:

$$\delta\bar{\psi}^{A,B} = \frac{1}{2}(\delta\bar{\psi}^A + \delta\bar{\psi}^B),$$

gdzie  $\delta\bar{\psi}^A$  i  $\delta\bar{\psi}^B$  to średnie kąty misorientacji w przylegających strefach. Następnie wartości średnich kątów zostały zestawione z kątami misorientacji między początkowymi orientacjami ziaren po obu stronach granicy (z uwzględnieniem okresowych warunków brzegowych), co przedstawia Rys. 5.15. Podobnie, jak w przypadku wykresu wykonanego w celu weryfikacji pierwszej hipotezy dane prezentują bardzo duży rozrzut, choć można zaobserwować słabą, dodatnią korelację ( $r = 0,18$ ). Podsumowując, można stwierdzić, że rozdrobnienie ziaren przewidywane przez model CPFEM jest skomplikowanym zjawiskiem i nie można za pomocą zaprezentowanych prostych hipotez jednoznacznie odpowiedzieć na pytanie, dlaczego dane ziarno uległo, bądź nie uległo rozdrobnieniu. Z drugiej strony, wydaje się, że oba czynniki (trudność deformacji i duża misorientacja przy granicy) mają wpływ na kształt rozdrobnienia, co sugerują istniejące słabe dodatnie korelacje.



Rysunek 5.16: Mapy nowych ziaren wg kryterium  $\Psi_c = 5^\circ$  dla ziarna nr a) 5 i b) 64.

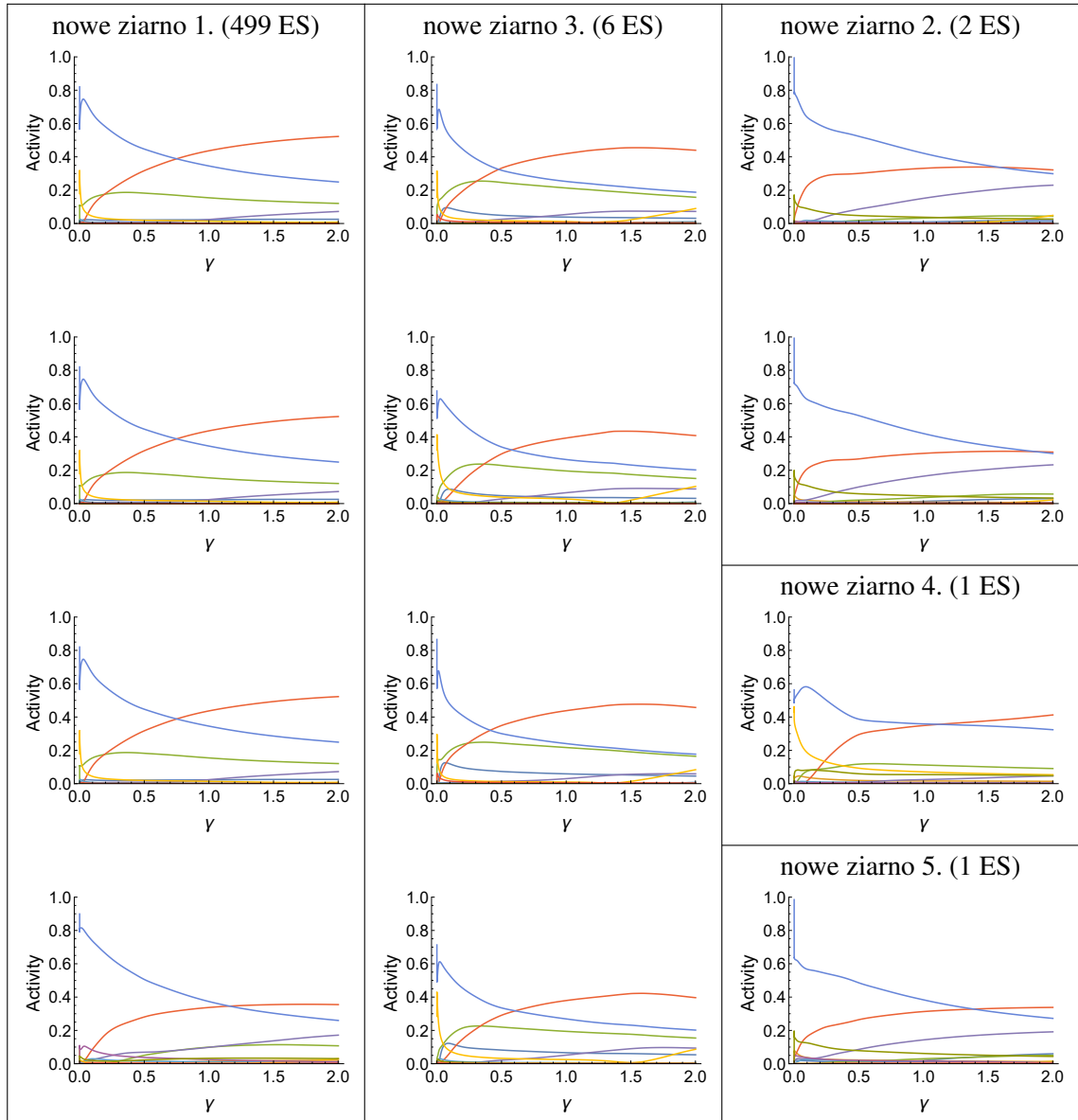
Postanowiono również sprawdzić, czy rozdrobnienie ziaren przewidywane przez model CPFEM jest wynikiem działalności innych systemów poślizgu w różnych częściach ziarna. W tym celu wybrano najbardziej i najmniej podzielone ziarna. Ziarno nr 5. (por. Rys. 5.16a) zostało podzielone na jedynie 8 nowych ziaren, z czego 499 z 512 ES należących do początkowego ziarna znalazło się w jednym nowym ziarnie. Pozostałe nowe ziarna zawierały od 1 do 6 ES. Rys. 5.17 przedstawia aktywności systemów poślizgu dla losowo wybranych elementów należących do nowych ziaren oznaczonych jako 1. i 3. (ziarno 1. zawierało 499, a ziarno 3. 6 ES) oraz dla elementów, z których zbudowane były nowe ziarna oznaczone jako 2., 4. i 5. Jak można się było spodziewać, w elementach należących do jednego nowego ziarna aktywowane są podobne grupy systemów poślizgu, natomiast między aktywnościami w ES należących do różnych nowych ziaren zachodzą istotne różnice.

Najsilniejszemu rozdrobnieniu uległo ziarno nr 64., które zostało podzielone na 296 nowych ziaren. Największe nowe ziarno (oznaczone numerem 17.) zawierało w tym wypadku 50 ES. Rys. 5.18 przedstawia wykresy aktywności systemów poślizgu dla wybranych elementów. Podobnie, jak w poprzednim przypadku, aktywności dla elementów należących do różnych nowych ziaren bardzo się od siebie różnią, natomiast wykresy aktywności dla elementów w jednym nowym ziarnie są podobne. Z drugiej strony, w przypadku stosunkowo dużego (50 ES) ziarna nr 17. występują dość duże różnice między wykresami dla różnych elementów. W przypadku nowego ziarna 1. należącego do ziarna 5., nie zaobserwowano tak dużych różnic. Można zatem podejrzewać, że gdyby deformacja zachodziła dalej, ziarno 17. uległoby dalszemu rozdrobnieniu. W ziarnie ulegającym dużemu rozdrobnieniu wewnątrz nowych ziaren występują większe zmiany aktywności systemów niż w przypadku nowych ziaren należących do ziarna ulegającego niewielkiemu rozdrobnieniu.

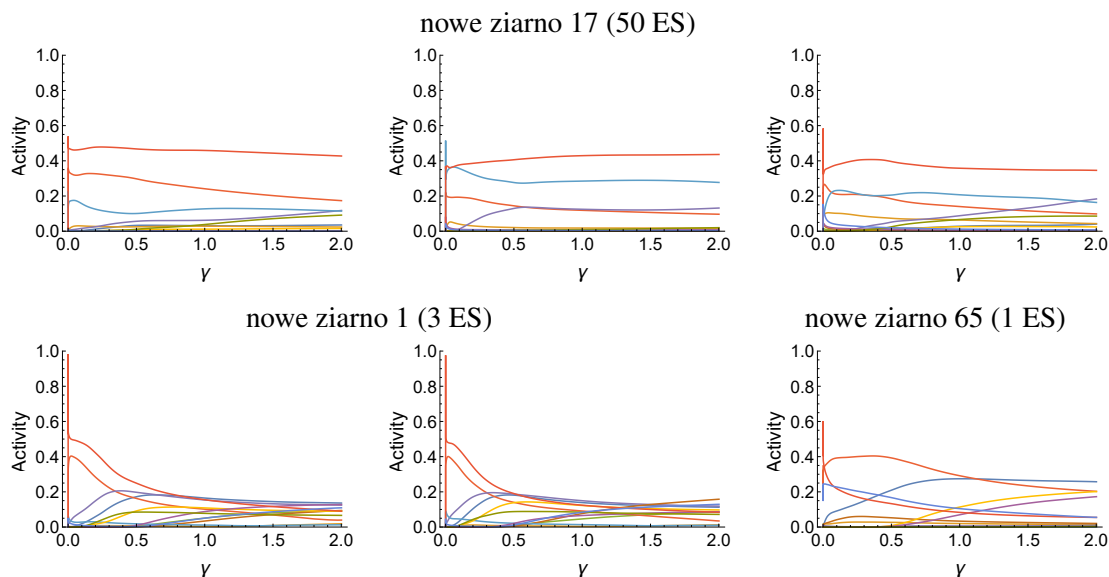
Następnie, wykonano wykresy aktywności systemów poślizgu wzdłuż linii elementów biegnącej przez początkowe ziarno w kierunku  $z$  dla ziaren 5 i 64. Linie biegnęły w pobliżu środków ścian  $xy$ . Wyniki są przedstawione na Rys. 5.19 i 5.20 odpowiednio dla początkowych ziaren 5. i 64. Można zauważyć, że w ziarnie 5., które uległo jedynie niewielkiemu rozdrobnieniu, zmiany aktywności systemów są bardzo umiarkowane, podczas gdy w ziarnie 64. są one bardzo duże.

#### *Odwzorowanie rzeczywistej mikrostruktury*

Idealizacja mikrostruktury materiału za pomocą teselacji Woronoja przypomina rzeczywistą strukturę ziaren, ponieważ generowanie teselacji można porównać do procesu zarodkowania i wzrostu ziaren (Diard et al., 2005). Z drugiej strony w przypadku używania regularnej siatki sześciociennych elementów skończonych granice między ziarnami mają ząbkowany kształt. Z kolei mikrostruktura wygenerowana z użyciem sześciociennych ziaren nie jest zbyt podobna do mikrostruktury rzeczywistego metalu, ale w rozważanym tu przypadku regularnej siatki sześciociennych elemen-



Rysunek 5.17: Względne aktywności poszczególnych systemów poślizgu dla losowo wybranych elementów należących do najmniej podzielonego ziarna nr 5. Każdy system poślizgu oznaczono innym kolorem..

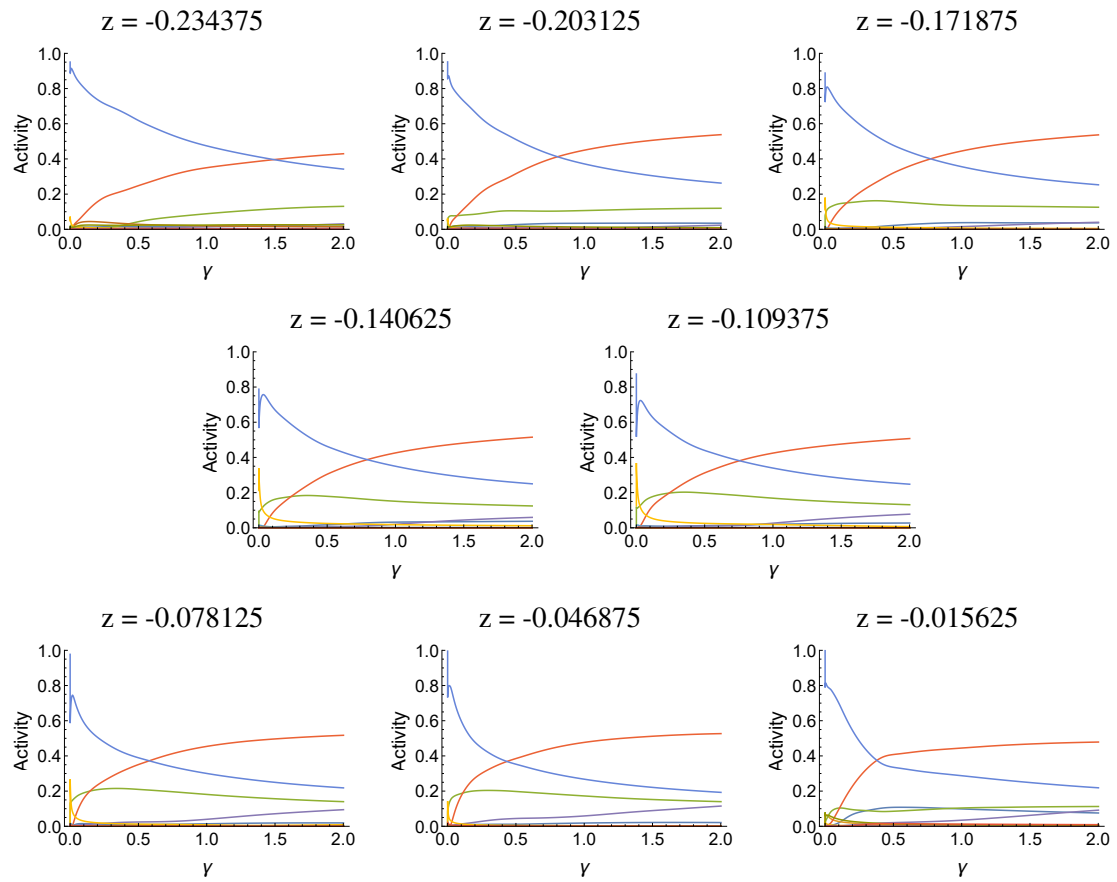


Rysunek 5.18: Względne aktywności poszczególnych systemów poślizgu dla losowo wybranych elementów należących do najsilniej podzielonego ziarna nr 64. Każdy system poślizgu oznaczono innym kolorem..

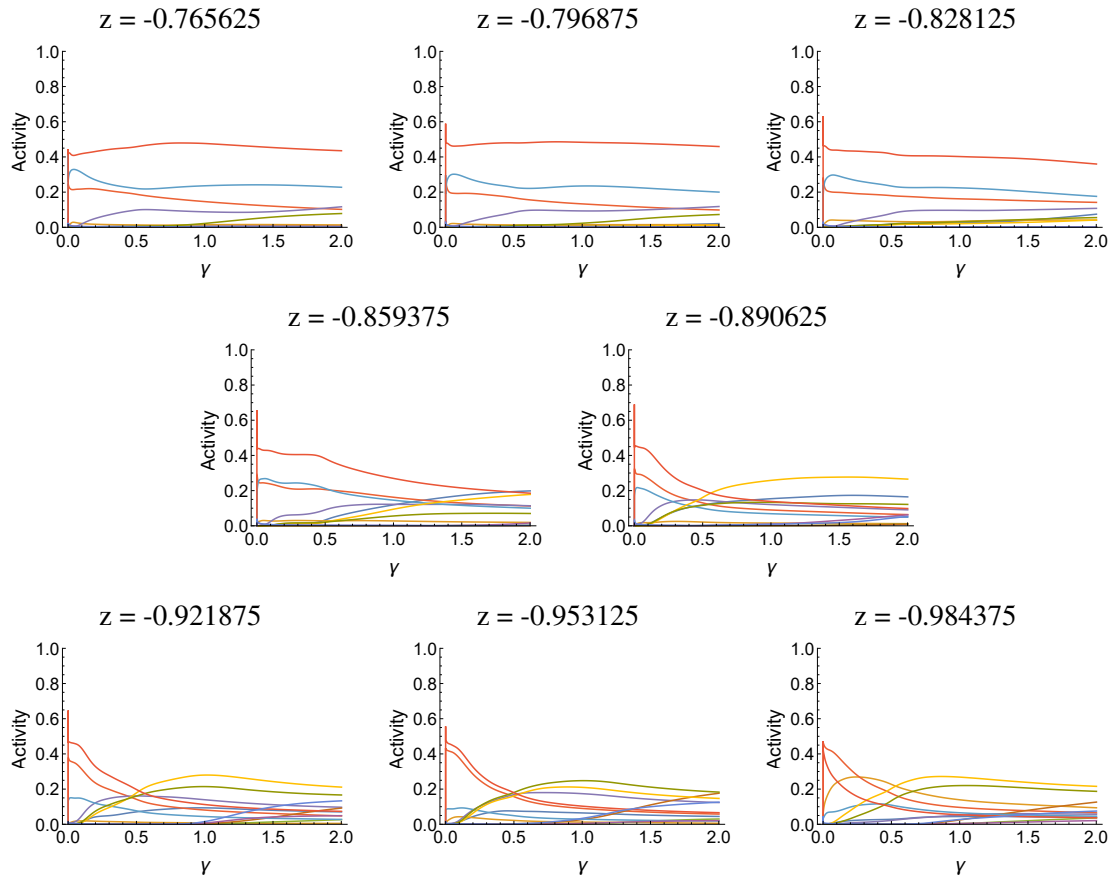
tów początkowe granice ziaren są płaskie. Diard et al. (2005) porównywali rozkłady pola naprężeń w pobliżu granic ziaren w przypadku użycia regularnej siatki elementów sześciściennych i nieregularnej siatki elementów czworościennych w modelu CPFEM dla materiałów o sieci A3. Zaobserwowali, że wyniki dla wnętrza ziaren nie różnią się od siebie, ale różnice w wartości naprężeń na granicy ziarna mogą być niedoszacowane dla siatki nieregularnej (z powodu ząbkowanego kształtu granicy). W związku z powyższym wydaje się, że również dyskutowane w rozprawie rozdrobienie ziaren w pobliżu granic otrzymane dla teselacji Woronoja może być niedoszacowane. Rozwiązaniem optymalnym wydaje się być więc użycie teselacji Woronoja i generacja nieregularnej siatki elementów czworościennych. W ten sposób oddane są topologiczne cechy mikrostruktury, jak i zachowane są płaskie granice początkowych ziaren. Należy tu zaznaczyć, że w przypadku użycia nieregularnej siatki trudniejsze stają się zarówno właściwa generacja periodycznej siatki, jak i późniejsze zadanie periodycznych warunków brzegowych. Wykonanie symulacji z użyciem takiego podejścia wykracza poza ramy niniejszej rozprawy, choć w przyszłości należałoby zbadać wpływ użycia bardziej precyzyjnie odwzorowanej mikrostruktury na przewidywane rozdrobienie ziaren.

### 5.3 Symulacje prób eksperymentalnych dla stopu AZ31b

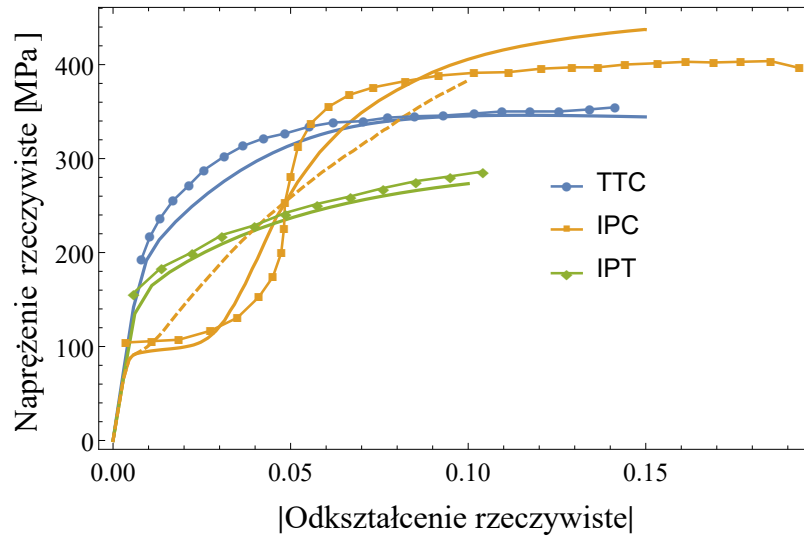
W celu przetestowania implementacji MES z aktywnym mechanizmem bliźniakowania przeprowadzono szereg symulacji numerycznych prób eksperymentalnych wykonanych dla próbek z walcowanej blachy i wyciskanego pręta stopu AZ31b, opisanych w sekcji 3.2.2. Wyniki symulacji (odpowiedź mechaniczna i tekstura krystalograficzna) zostały następnie porównane z wynikami eksperymentalnymi oraz wynikami uzyskanymi za pomocą modelu dwuskalowego. W celu uzyskania wyników otrzymanych w bieżącej sekcji użyto przybliżenia rzeczywistego materiału za pomocą sześciennych ziaren (każde ziarno stanowiło jeden element skończony). Takie podejście jest uzasadnione, gdy interesuje nas odpowiedź materiału na poziomie agregatu polikrystalicznego (Mika i Dawson, 1998). Wyniki symulacji z użyciem wielu elementów na ziarno zostały przedstawione



Rysunek 5.19: Względne aktywności poszczególnych systemów poślizgu dla elementów na linii biegnącej równoległe do kierunku  $z$  w pobliżu środków ścian  $xy$  dla najmniej rozdrobionego ziarna nr 5. Każdy system poślizgu oznaczono innym kolorem..



Rysunek 5.20: Względne aktywności poszczególnych systemów poślizgu dla elementów na linii biegnącej równoległe do kierunku  $z$  w pobliżu środków ścian  $xy$  dla najsilniej rozdrobionego ziarna nr 64. Każdy system poślizgu oznaczono innym kolorem..



Rysunek 5.21: Odpowiedź mechaniczna w testach: jednoosiowego rozciągania w płaszczyźnie blachy (IPT), ściskania w płaszczyźnie blachy (IPC) i po grubości blachy (TTC) dla próbek wyciętych z walcowanej blachy wykonanej ze stopu AZ31b. Linia ciągła - symulacje, linia z markerami - eksperyment (Proust et al., 2009), linia przerywana - krzywa naprężenie-odkształcenie uzyskana dla niezmodyfikowanego warunku reorientacji.

w poprzedniej sekcji. W tym wypadku tak gęsta siatka była potrzebna w celu analizy zjawiska rozdrobnienia ziaren.

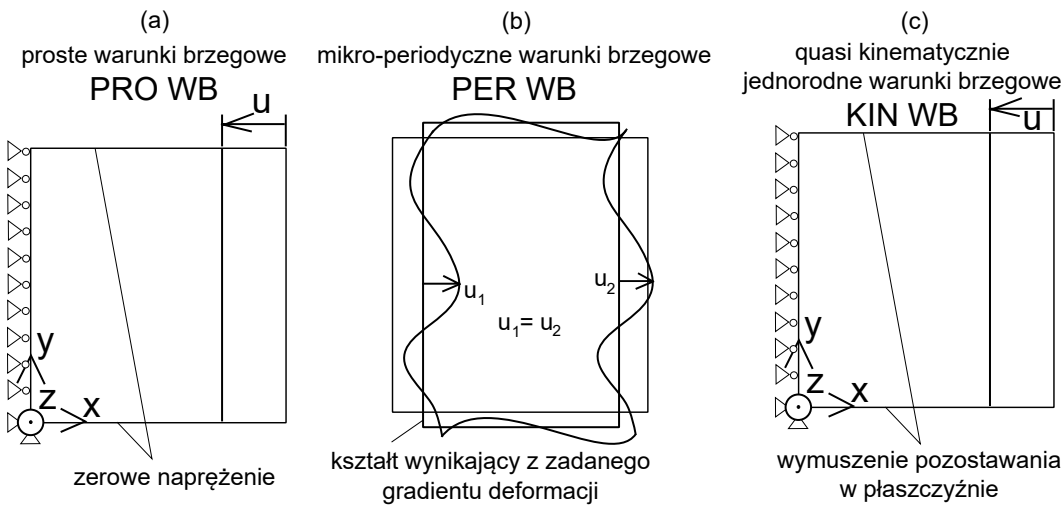
Zarówno w przypadku próbek wyciętych z blachy, jak i dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta, przedstawione w kolejnych sekcjach symulacje prób eksperymentalnych z użyciem CPFEM przeprowadzono dla pojedynczego zestawu parametrów umocnienia przedstawionego w tabeli 5.1. Wykorzystywane w dalszych symulacjach parametry, podobnie do (Kowalczyk-Gajewska, 2011), zostały wstępnie dobrane poprzez porównanie wyników symulacji i testów ściskania i rozciągania próbek wyciętych z walcowanej blachy przedstawionych w pracy (Proust et al., 2009). Przy identyfikacji parametrów założono mikro-periodyczne warunki brzegowe (dyskusję założonych warunków brzegowych przedstawiono w następnej sekcji). Dobłą zgodność z eksperymentem dla testu ściskania w płaszczyźnie blachy (IPC) udało się uzyskać jedynie dla zmodyfikowanego warunku reorientacji (Rys. 5.21).

### 5.3.1 Symulacje dla próbek z walcowanej blachy

Oczekuje się, że dla reprezentatywnego elementu objętości (RVE) właściwości efektywne nie będą zależeć od rodzaju używanych warunków brzegowych (Besson et al. (2010), s. 204). W związku z tym wyznaczono wymagany rozmiar RVE poprzez przeprowadzenie symulacji dla coraz większej liczby orientacji (a co za tym idzie coraz większej liczby ES, ponieważ każdy z nich miał jedną orientację) dla trzech rodzajów warunków brzegowych (WB): prostych (PRO), mikro-periodycznych (PER) i quasi kinematycznie jednorodnych (KIN). Sześcian poddany prostym WB miał zadane zerowe przemieszczenie w kierunku  $x$  na ścianie  $x = 0$  i ujemne (dodatnie) przemieszczenie w kierunku  $x$  na ścianie przeciwległej dla przypadku ściskania (rozciągania), por. Rys. 5.22a. Mikro-periodyczne warunki brzegowe zapewniają zgodność przemieszczeń dla węzłów na przeciw-

Tablica 5.1: Parametry modelu CPFEM dla stopu AZ31b. W celu zwięzłości opisu użyte zostały angielskie nazwy i skróty: pri (pryzmatyczny), bas (bazalny), pyr (piramidalny <c+a> drugiego rzędu) i twi (bliźniakowanie). Indeksy *ss*, *st*, *ts* i *tt* oznaczają oddziaływania odpowiednio między poślizgiem i poślizgiem, poślizgiem i bliźniakowaniem, bliźniakowaniem i poślizgiem oraz bliźniakowaniem i bliźniakowaniem.

| System | $\tau_{c0}$<br>[kPa] | $\tau_1$<br>[kPa] | $\theta_0^{ss/ts}$<br>[kPa] | $\theta_0^{st/tt}$<br>[kPa] | $\theta_1^{ss/ts}$<br>[kPa] | $\theta_1^{st/tt}$<br>[kPa] | $q_{pri}$ | $q_{bas}$ | $q_{pyr}$ | $q_{twi}$ |
|--------|----------------------|-------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| pri    | 0.1122               | 0.0557            | 0.609                       | 1.0                         | 0.0                         | 0.00001                     | 1.0       | 1.0       | 1.0       | 1.6       |
| bas    | 0.0029               | 0.0783            | 0.03016                     | 0.9                         | 0.0                         | 0.00001                     | 1.0       | 1.0       | 0.5       | 1.6       |
| pyr    | 0.1350               | 0.0709            | 1.585                       | 1.0                         | 0.0                         | 0.0002                      | 1.0       | 1.0       | 1.0       | 1.4       |
| twi    | 0.0649               | 0.0100            | 0.0                         | 0.95                        | 72.5                        | 0.001                       | 0.0       | 0.0       | 1.0       | 1.4       |



Rysunek 5.22: Schemat prostych (PRO), mikro-periodycznych (PER) i quasi kinematycznie jednorodnych (KIN) warunków brzegowych.

lełych stronach sześcianu, por. Rys. 5.22b. Przedstawia je równanie

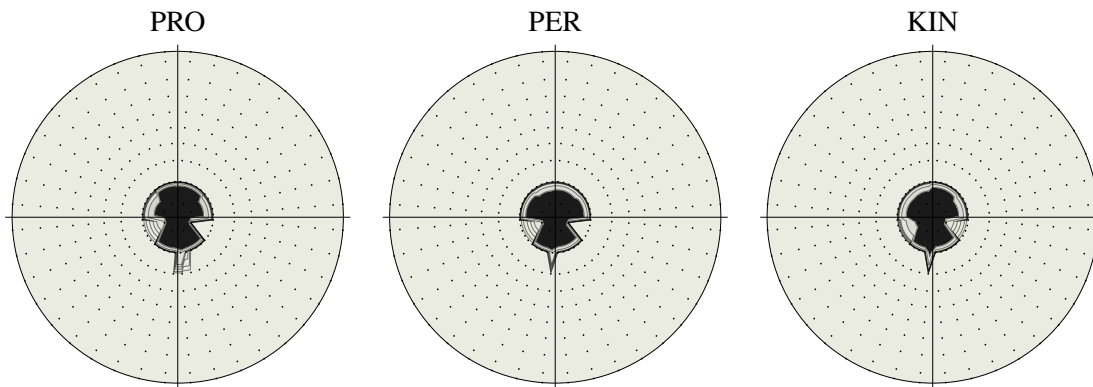
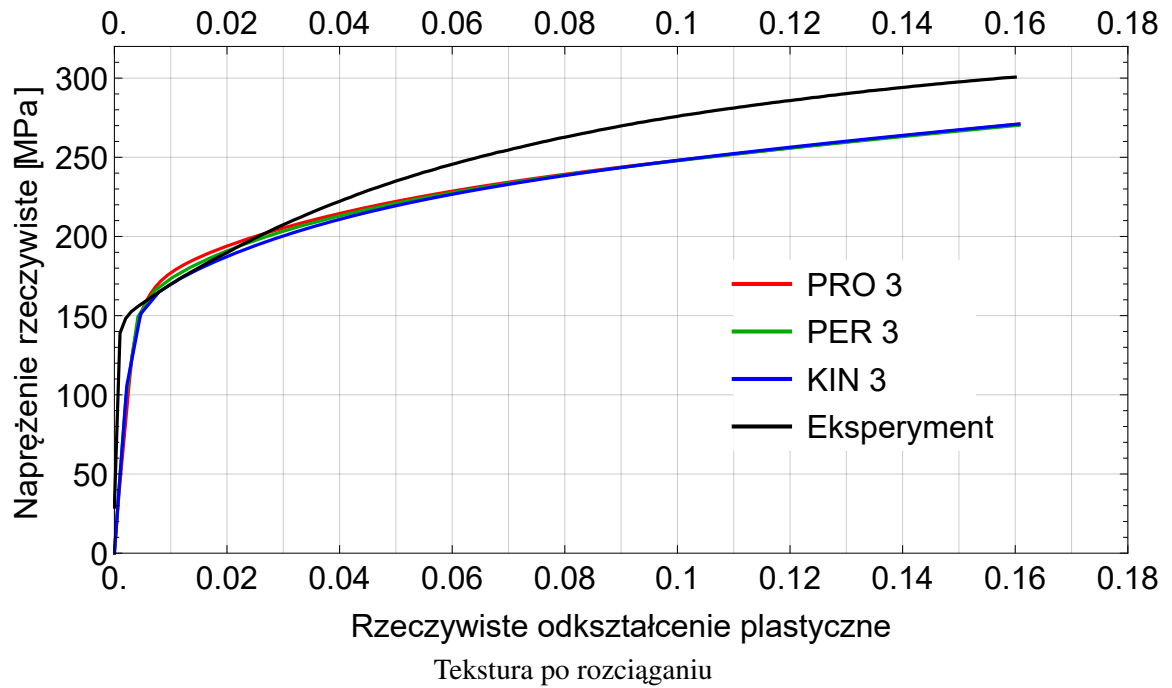
$$\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I})(\mathbf{X}_A - \mathbf{X}_B), \quad (5.12)$$

gdzie  $\bar{\mathbf{F}}$  jest jednorodnym gradientem deformacji dla ściskania lub rozciągania. Warunki quasi kinematycznie jednorodne składały się z warunków prostych i dodatkowego wymagania, aby boczne ściany sześcianu pozostawały płaskie, por. Rys. 5.22c.

Rysunek 5.23 przedstawia krzywe naprężenie-odkształcenie uzyskane w eksperymentalnej próbie rozciągania oraz w odpowiadającej jej symulacji dla różnych warunków brzegowych, jak również tekstury uzyskane w symulacji. Jak widać, w przypadku rozciągania, dla którego symulacja nie przewiduje aktywności bliźniakowania z powodu silnej wstępnej tekstury (por. Rys. 5.34a) zorientowanej niekorzystnie dla jego działania, wyniki zależą w bardzo niewielkim stopniu od warunków brzegowych. Można powiedzieć, że w tym przypadku użycie 27 orientacji (podział sześcianu 3x3x3) jest wystarczające w odniesieniu do przewidywania makroskopowej odpowiedzi mechanicznej elementu objętości.

W przypadku ściskania w płaszczyźnie blachy aktywne staje się bliźniakowanie, co powoduje, że deformacja staje się bardziej niejednorodna niż w przypadku działania jedynie systemów po-





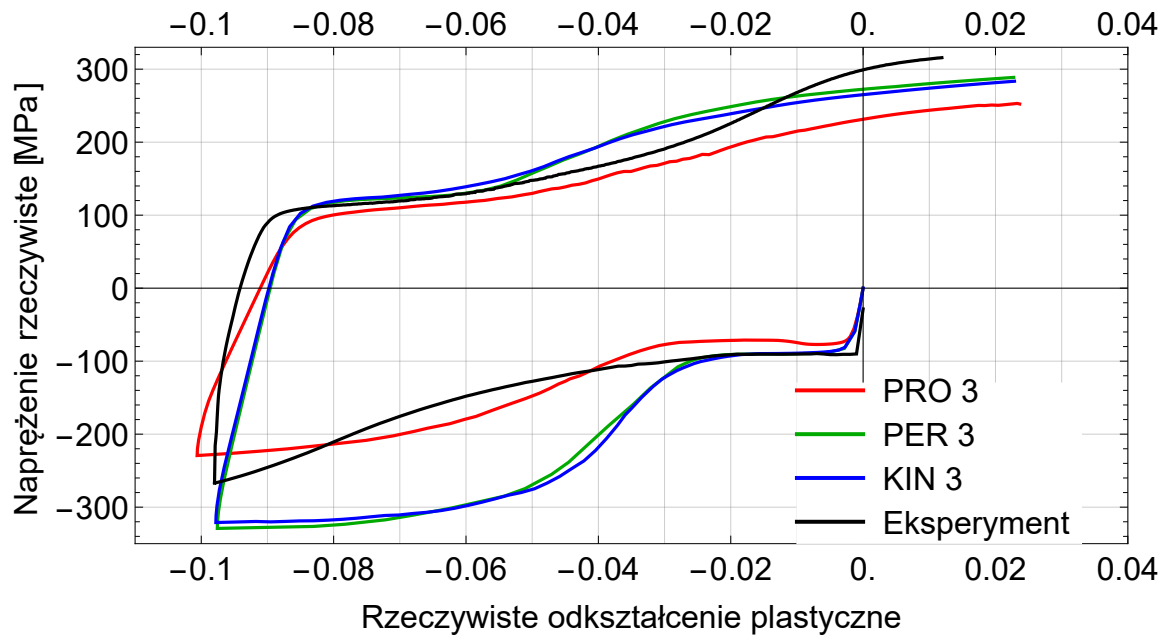
Rysunek 5.23: Porównanie odpowiedzi mechanicznej (krzywe napężenie-odkształcenie) i tekstur (figury biegunowe {0001}) dla różnych warunków brzegowych i 27 orientacji w przypadku symulacji rozciągania.

ślizgu, a uzyskana w symulacji odpowiedź materiału staje się w większym stopniu zależna od zadanych warunków brzegowych. Rysunek 5.24 przedstawia porównanie odpowiedzi mechanicznej (krzywe naprężenie rzeczywiste – rzeczywiste odkształcenie plastyczne. Odkształcenie to wyznaczono jako różnicę między całkowitym odkształceniem rzeczywistym, a wartością rzeczywistego naprężenia dzielonego przez moduł Younga równy ok. 40,3 MPa. Moduł został wyznaczony na podstawie krzywych eksperymentalnych.) i tekstur (figury biegunowe {0001}) dla różnych warunków brzegowych i 27 orientacji w przypadku kolejnego ściskania i rozciągania. Warunki KIN i PER dają w tym przypadku zbliżony poziom naprężenia, natomiast naprężenia dla prostych WB są znacznie mniejsze. Jest to spowodowane tym, że w przypadku PRO materiał ma możliwość dużej lokalizacji odkształcenia, pozwalającej na deformację przede wszystkim na łatwych systemach deformacji, por. Rys. 5.25a. W przypadku KIN i PER deformacja sześcienu jest znacznie bardziej ograniczona (por. Rys. 5.25b i c), co wymusza deformację na trudnych systemach lub deformację na łatwych systemach, ale przy udziale wyższych naprężeń. Z powodu podobieństwa PER i KIN WB oraz z powodu faktu, że dla większej liczby orientacji występowały problemy z osiągnięciem zbieżności dla KIN WB, w dalszej kolejności będą przedstawione wyniki tylko dla PRO i PER WB.

Rysunki 5.26-5.31 przedstawiają wyniki uzyskane dla podziału krawędzi sześcienu na 5, 7, 9, 11, 13 i 15 części, czyli dla agregatu polikrystalicznego zawierającego odpowiednio  $5^3 = 125$ ,  $7^3 = 343$ ,  $9^3 = 729$ ,  $11^3 = 1331$ ,  $13^3 = 2197$  i  $15^3 = 3375$  orientacji. Krzywe dla rozciągania dla WB PRO i PER są w każdym z tych przypadków bardzo do siebie zbliżone, występują natomiast dość duże różnice między poziomami naprężeń przy ściskaniu, które zmniejszają się wraz ze wzrostem liczby orientacji. Z drugiej strony dla coraz większych zadań coraz trudniej jest uzyskać zbieżność, zwłaszcza dla PRO WB. Największe zadanie, które udało się przeliczyć do końca przy użyciu obu rodzajów WB zawierało  $9^3 = 729$  orientacji i ES. W przypadku  $7^3 = 343$  różnice między krzywymi były tylko nieznacznie mniejsze niż w przypadku  $9^3 = 729$ , co wzięwszy pod uwagę znacznie mniejszy koszt obliczeniowy uzasadnia zastosowanie takiej wielkości RVE do dalszych symulacji. Różnice między odpowiedziami mechanicznymi dla obu rodzajów WB przy takiej wielkości RVE nie są co prawda zanedbywalnie małe, ale dokładność jest wystarczająca na użytek niniejszego rozdziału. W dalszej części używane były mikro-periodyczne warunki brzegowe (PER), które zdaniem autora lepiej oddają deformację RVE w trakcie próby ściskania (boczne ściany kostki nie mogą deformować się swobodnie, gdyż są ograniczane przez sąsiednie objętości). Ponadto, jak widać na rysunkach 5.26-5.31, zbliżenie poziomów naprężeń dla obu rodzajów WB zachodzi poprzez przybliżanie się krzywej dla PRO WB do krzywej dla PER WB, a nie na odwrót. Za użyciem PER WB przemawia także to, że przy ich wykorzystaniu zadanie staje się bardziej stabilne numerycznie (por. np. Rys. 5.29).

Rys. 5.32 przedstawia krzywe naprężenie-odkształcenie uzyskane w eksperymencie opisanym w sekcji 3.2.2 oraz symulacjach przy użyciu modelu dwuskalowego i kontynualnego. W przypadku obu modeli nie udało się dokładnie odwzorować kształtu krzywych (z wyjątkiem symulacji rozciągania modelem VPSC, gdzie krzywa uzyskana w symulacji jest bardzo blisko krzywej eksperymentalnej). Nie jest zaskoczeniem, że model mikromechaniczny przewiduje krzywe bardziej zbliżone do eksperymentalnych, ponieważ w oparciu o te krzywe przeprowadzono wcześniej optymalizację parametrów tego modelu. Takiej optymalizacji nie przeprowadzono dla modelu CPFEM. Z drugiej strony w modelu VPSC nie ma sprężystości, która jest obecna w modelu kontynualnym. Uwzględnienie odkształceń sprężystych pozwala na przewidywanie łagodnej zmiany znaku naprężeń przy zmianie kierunku obciążenia.

Rys. 5.33 przedstawia aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowane bliźniakowanie (liczone na dwa sposoby opisane w sekcji 5.1). Rysunek można porównać z analogicznym Rys. 3.14 uzyskanym przy użyciu modelu dwuskalowego (na Rys. 5.33 wykres dla kolejnego ściskania, odciążenia i rozciągania został rozbity na dwa wykresy, podczas gdy na Rys. 3.14

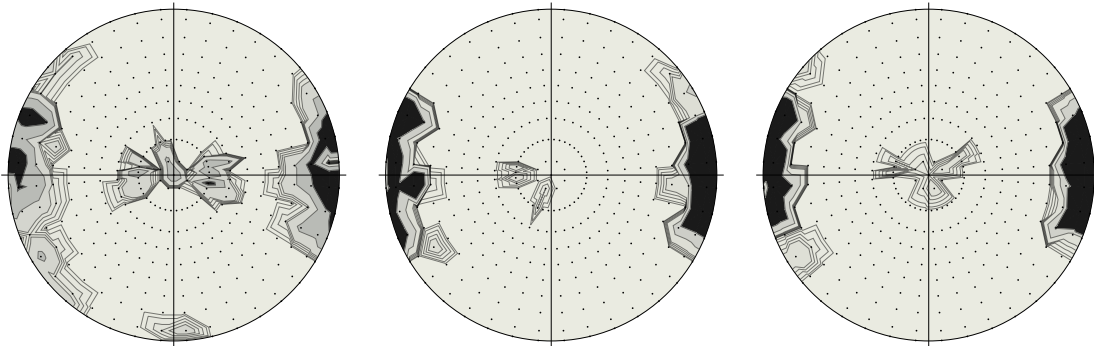


PRO

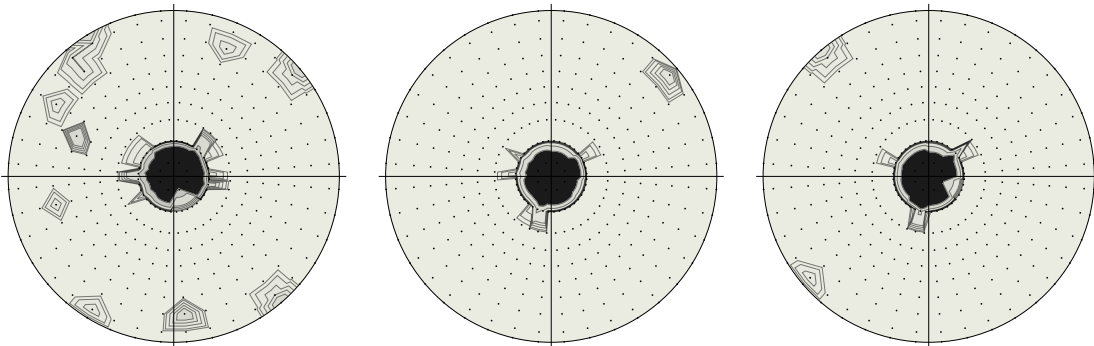
PER

KIN

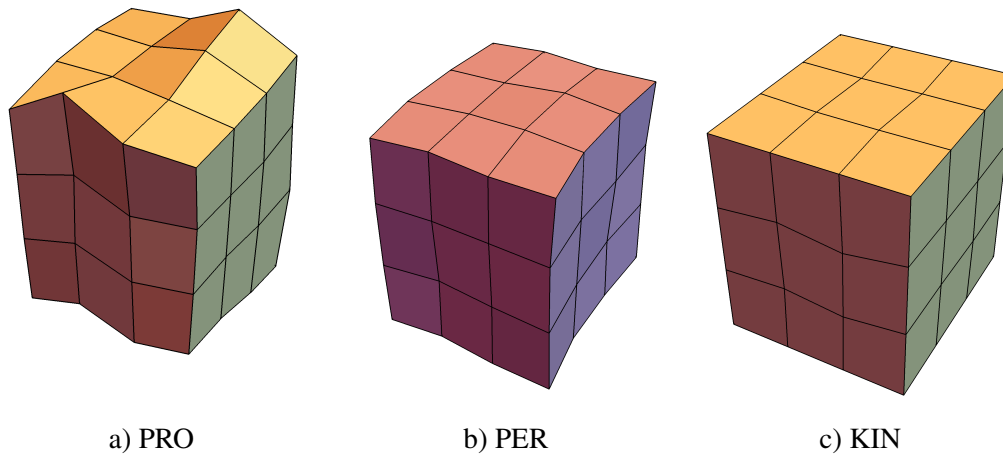
Tekstura po ścisnaniu



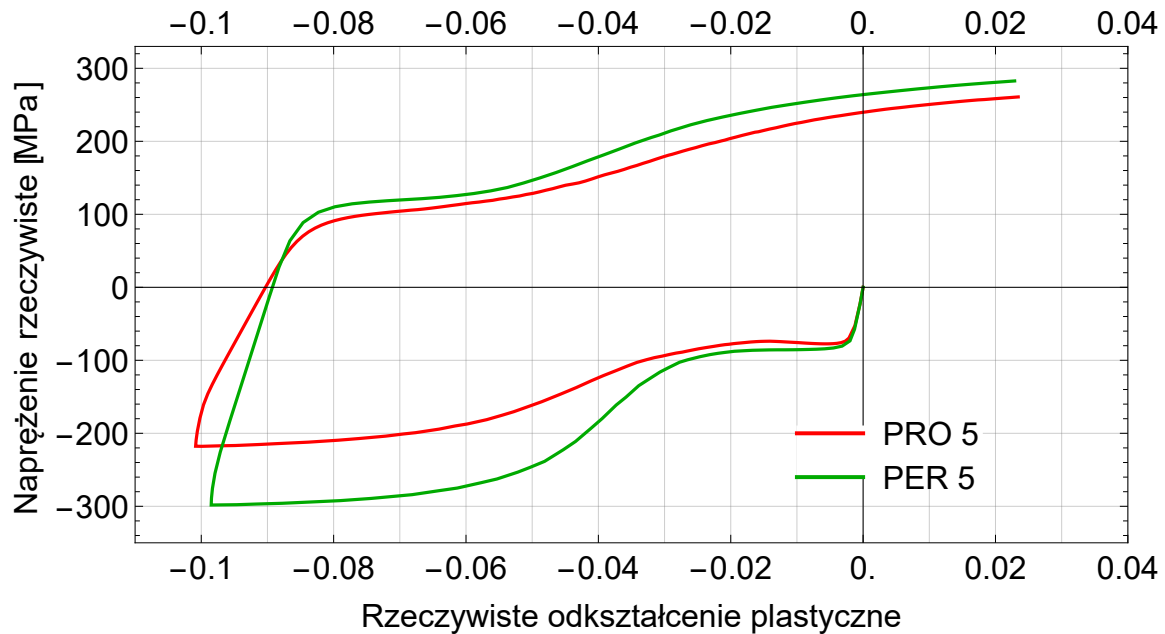
Tekstura po rozciąganiu



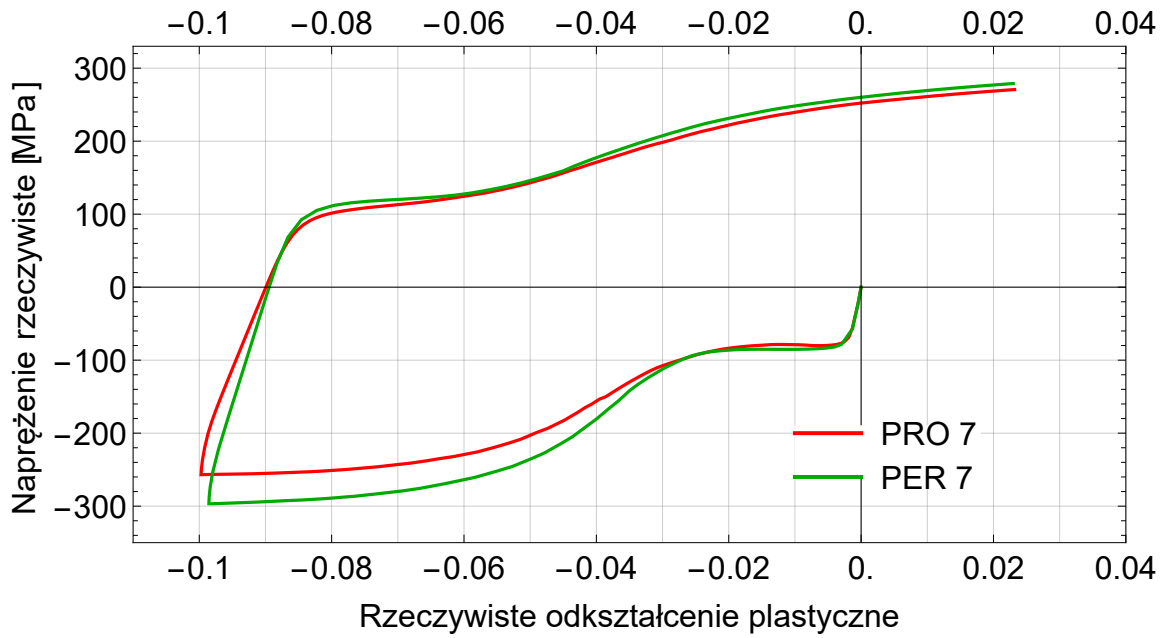
Rysunek 5.24: Porównanie odpowiedzi mechanicznej (krzywe napężenie-odkształcenie) i tekstur (figury biegunowe {0001}) dla różnych warunków brzegowych i 27 orientacji dla symulacji kolejnego ścisnienia i rozciągania.



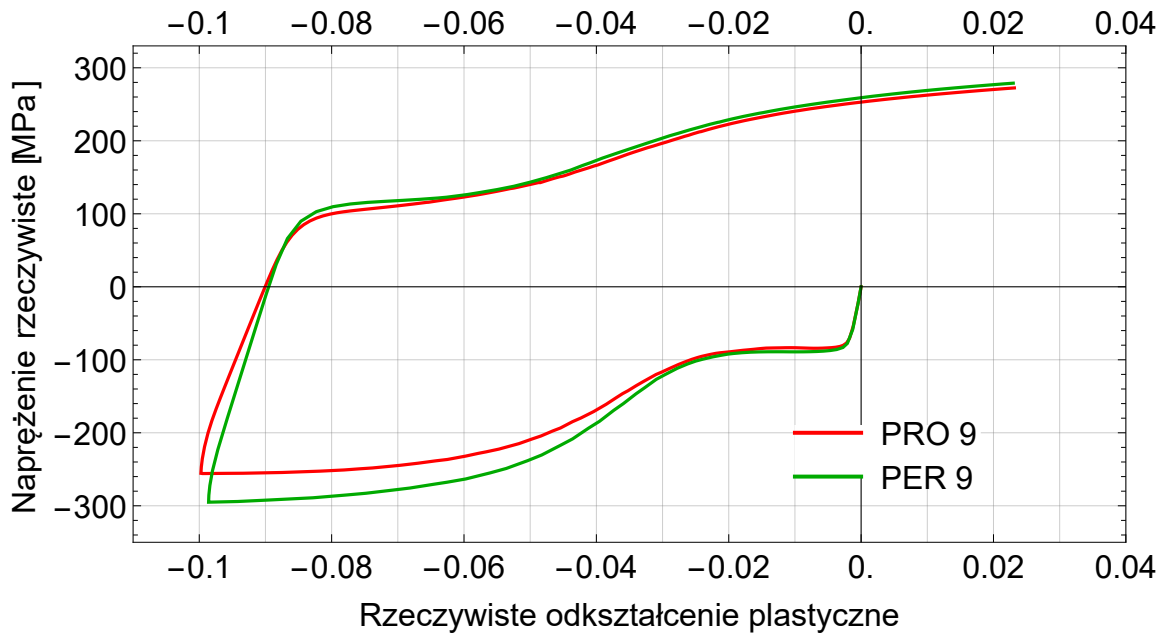
Rysunek 5.25: Zdeformowany element objętości dla maksymalnej wartości odkształceń ściskających w przypadku: a) prostych, b) mikro-periodycznych i c) kinematycznie jednorodnych WB.



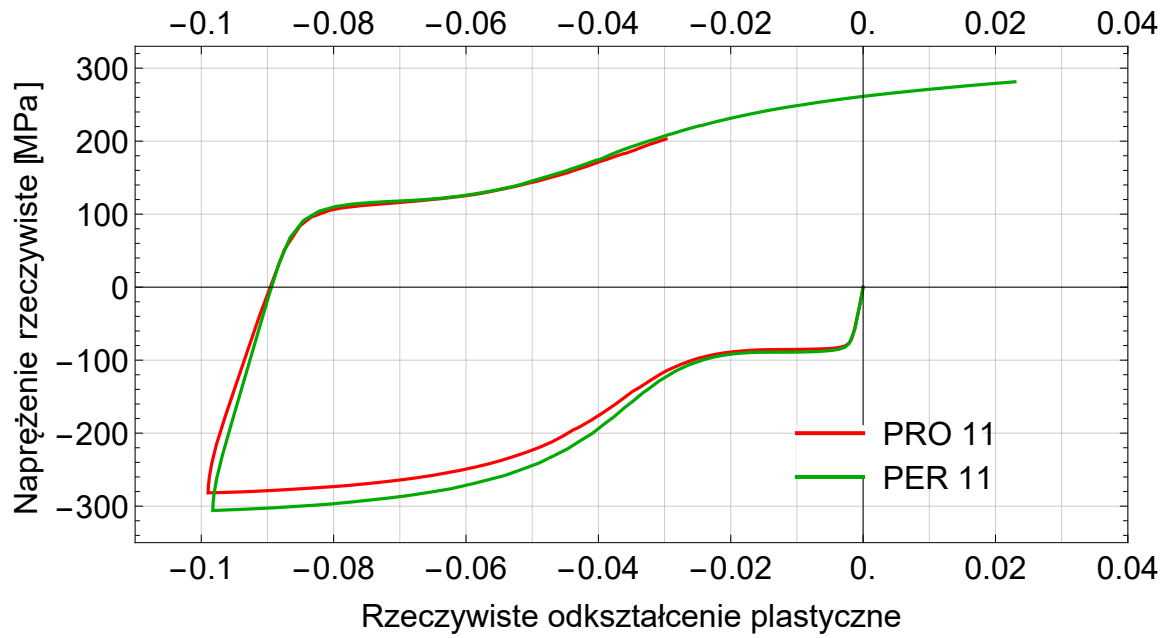
Rysunek 5.26: Krzywe naprężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 125 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 5).



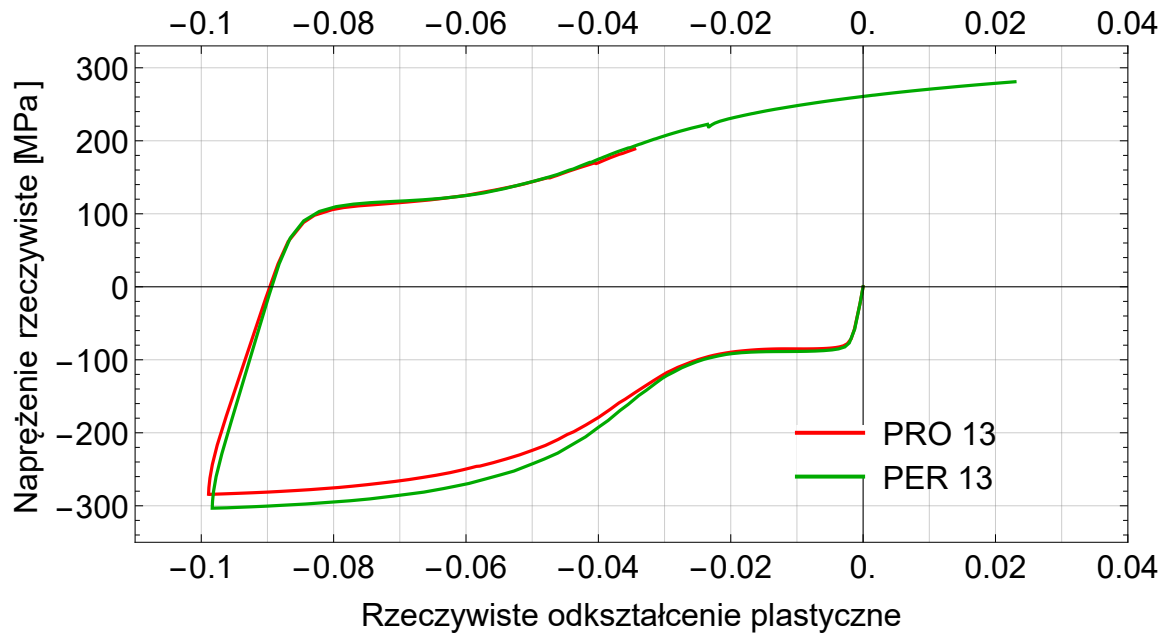
Rysunek 5.27: Krzywe napężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 343 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 7).



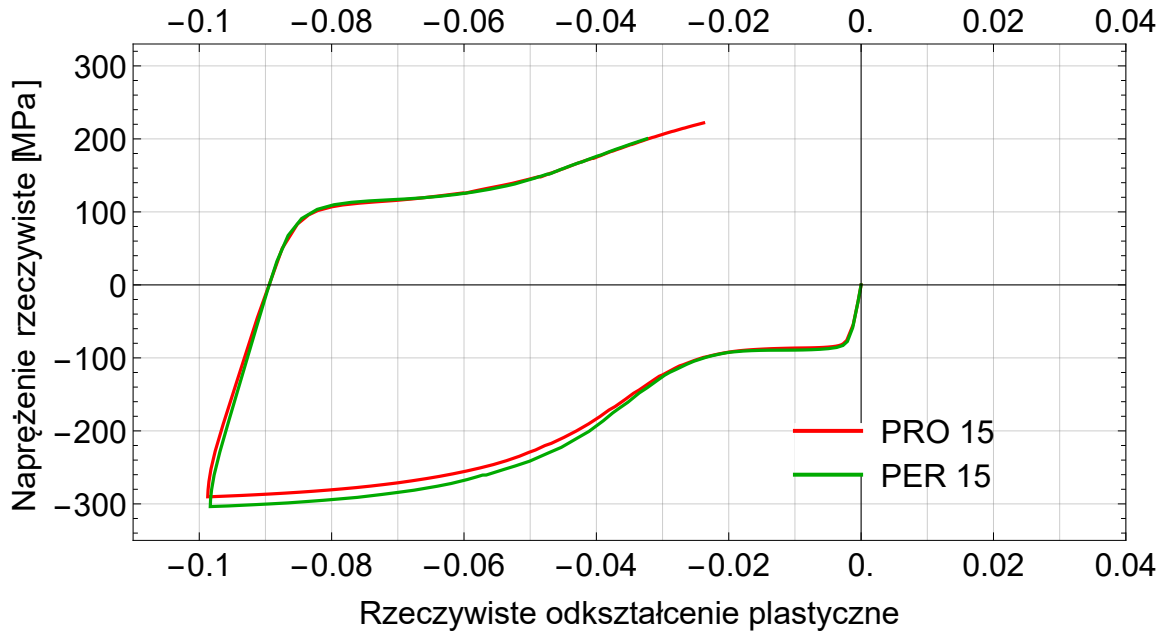
Rysunek 5.28: Krzywe napężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 729 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 9).



Rysunek 5.29: Krzywe naprężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 1331 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 11).



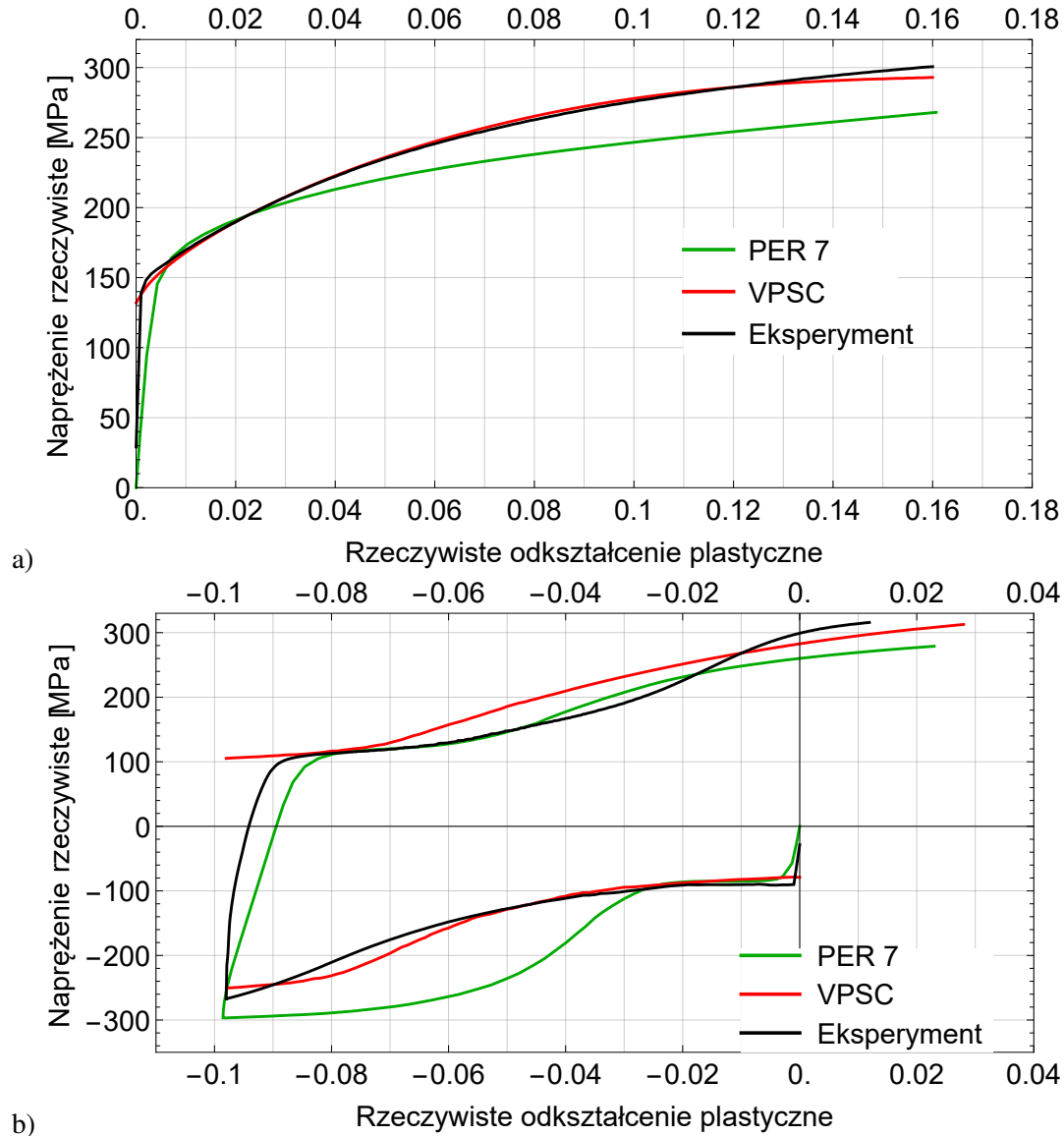
Rysunek 5.30: Krzywe naprężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 2197 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 13).



Rysunek 5.31: Krzywe naprężenie-odkształcenie dla PRO i PER WB dla 3375 orientacji (podział krawędzi sześcianu na 15).

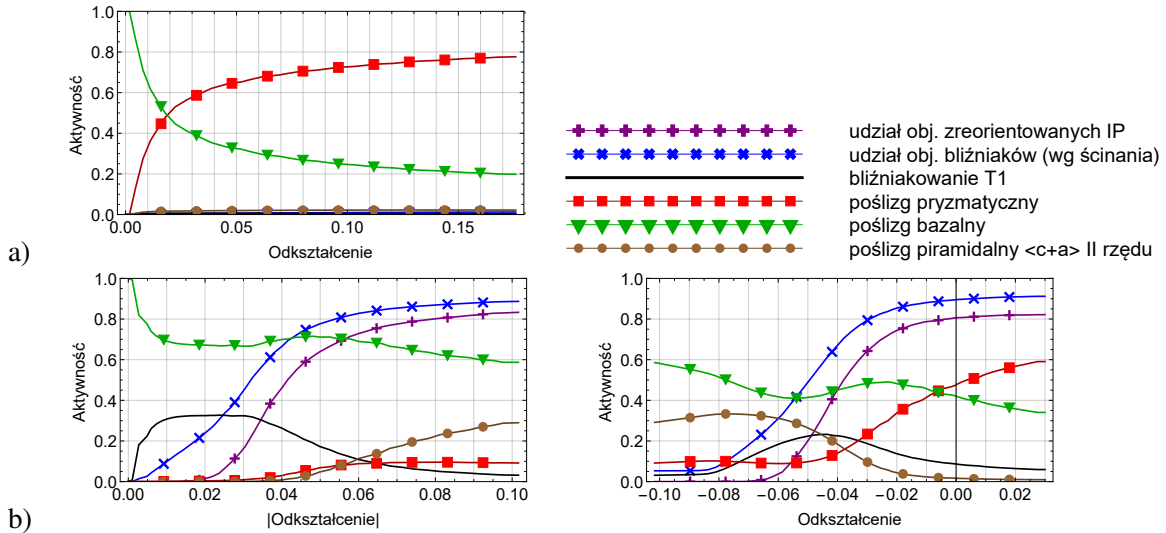
zamieszczony został w tym przypadku jeden wykres). W modelach dwu- i trójskalowym używana była procedura PTVK, która zapewnia zgodność zakumulowanego bliźniakowania liczonego na oba sposoby podane na końcu rozdziału drugiego, dlatego w rozdziałach trzecim i czwartym na wykresach zakumulowane bliźniakowanie oznaczane było jedną krzywą. W modelu CPFEM, ze względu na użycie zmodyfikowanego warunku reorientacji, zgodność obu wielkości nie jest zapewniona, dlatego na wykresach prezentowane będą dwie krzywe. Przy rozciąganiu wykresy aktywności dla obu modeli są początkowo podobne. W modelu dwuskalowym w miarę umocnienia poślizgu pryzmatycznego, jego aktywność spada, i dominujący staje się poślizg piramidalny. W symulacji MES, poślizg piramidalny nie został w widocznym stopniu uruchomiony. W wypadku rozciągania krzywa naprężenie-odkształcenie uzyskana w modelu dwuskalowym jest bliższa wynikom doświadczenia, dlatego wydaje się, że optymalizacja parametrów umocnienia w CPFEM mogłaby w tym przypadku poprawić przewidywanie odpowiedzi mechanicznej materiału. W przypadku ściskania oba modele przewidują dominację poślizgu bazalnego i reorientację większości ziaren na skutek bliźniakowania. Podczas kolejnego rozciągania model MES przewiduje wyższą niż model 2SCP aktywność systemu piramidalnego. Różnica między udziałami objętościowymi bliźniaków wyznaczonymi w obu modelach jest tylko pozorna i wynika ze sposobu ich zliczania: w modelu 2SCP odbliźniaczanie po zmianie drogi deformacji prowadzi do zmniejszenia udziału objętościowego bliźniaków, natomiast w modelu MES udział objętościowy bliźniaków przy zmianie drogi deformacji jest zerowany, a działające dalej odbliźniaczanie prowadzi do jego wzrostu.

Rys. 5.34 przedstawia tekstury uzyskane w symulacji modelem kontynualnym. Tekstury a-d odpowiadają analogicznym teksturom uzyskanym w eksperymencie (Rys. 3.7) i symulacji modelem VPSC (Rys. 3.15). W symulacjach udało się odwzorować najważniejsze składowe tekstury eksperymentalnych. W przypadku tekstury po ściskaniu i kolejnym rozciąganiu bliższa doświadczeniu jest tekstura uzyskana w symulacji modelem kontynualnym, ponieważ, podobnie jak w eksperymencie, jest ona „słabsza” niż tekstura po samym rozciąganiu.



Rysunek 5.32: Krzywe napężenie-odkształcenie uzyskane w eksperymencie (linia czarna), symulacji modelem dwuskalowym VPSC (linia czerwona) oraz symulacji modelem kontynualnym z PER WB i 343 ES-orientacji (podział krawędzi sześciangu na 7) w przypadku a) rozciągania i b) ściskania i rozciągania.



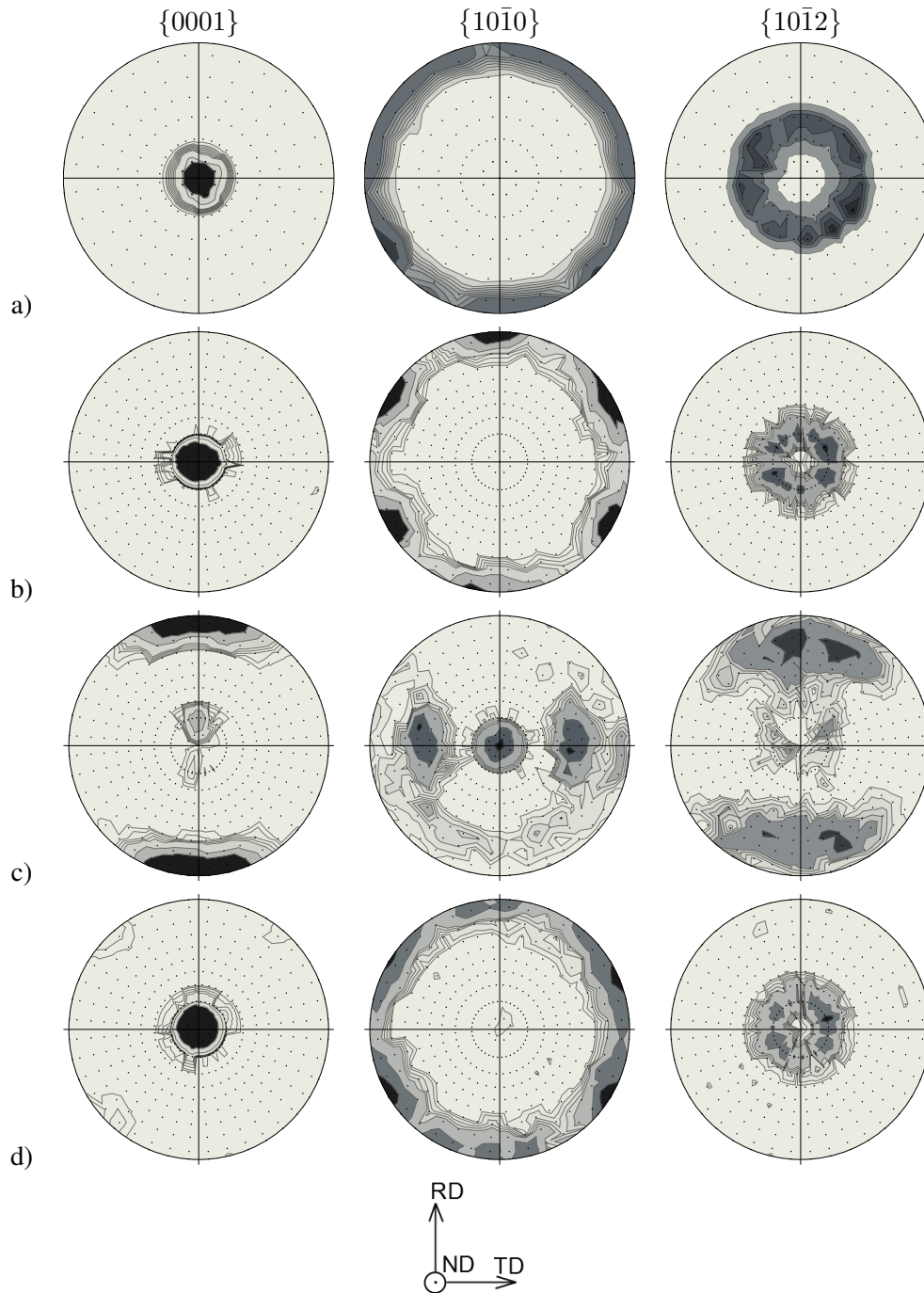


Rysunek 5.33: Aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowane bliźniakowanie uzyskane w symulacji modelem kontynuacyjnym z PER WB i 343 ES-orientacji (podział krawędzi sześciangu na 7) w przypadku a) rozciągania i b) ściskania i rozciągania.

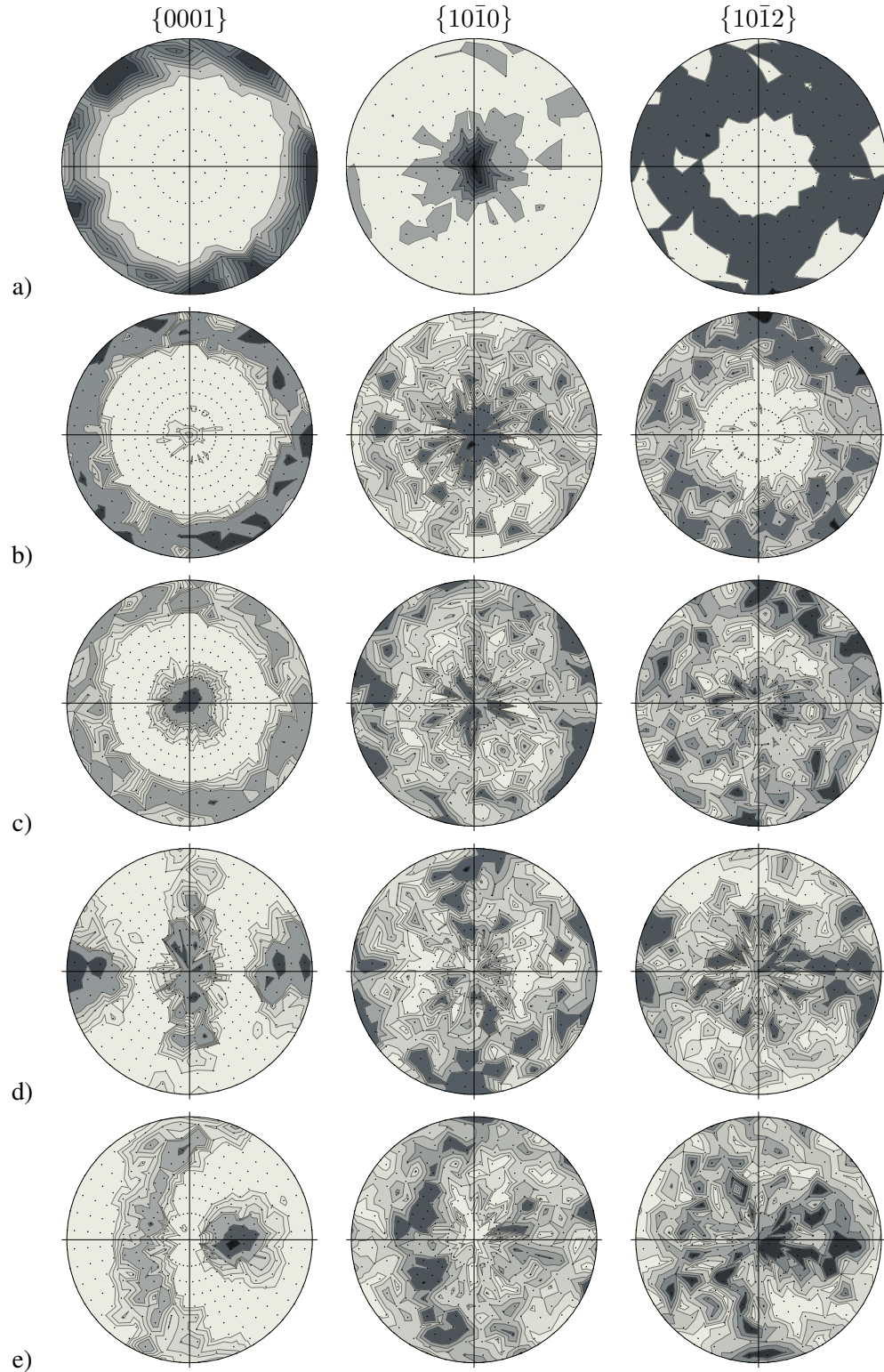
### 5.3.2 Symulacje dla próbek z wyciskanego pręta

W dalszej kolejności przeprowadzono symulacje numeryczne prób eksperymentalnych wykonanych na próbkach wyciętych z wyciskanego pręta ze stopu AZ31b opisanych w sekcji 3.2.2. Symulacje przeprowadzono dla identycznych parametrów jak w poprzedniej sekcji (Tab. 5.1) oraz dla wstępnej tekstury przedstawionej na Rys. 5.35a. W każdym przypadku ściskanie następowało w tym samym kierunku, a zmiana drogi deformacji była uzyskiwana przez obrót sieci krystalograficznej, przy pozostawieniu wartości parametrów umocnienia bez zmian. W przypadku symulacji ściskania w kierunkach pod kątem  $45^\circ$  i  $90^\circ$  do ED tekstura była odpowiednio obracana. W przypadku wstępnego ściskania i kolejnego ściskania w kierunkach pod kątem  $45^\circ$  i  $90^\circ$  do ED, tekstura uzyskana we wstępnej deformacji również była odpowiednio obracana. Symulacje przeprowadzono dla mikro-periodycznych WB i  $7^3 = 343$  orientacji, zgodnie z analizą przeprowadzoną dla blachy. Wyjątkiem była symulacja ściskania w kierunku prostopadłym do ED, dla której nie udało się uzyskać zbieżności dla takiej liczby orientacji. W związku z tym, obliczenia zostały przeprowadzone dla  $6^3 = 216$  orientacji. Rys. 5.35 przedstawia tekstury analogiczne do przedstawionych na rysunkach 3.4 (wyniki eksperymentalne) i 3.11 (symulacja modelem VPSC). Tekstury zostały dobrze odwzorowane - na figurach biegunowych można dostrzec wszystkie najważniejsze komponenty. Warto zauważyć, że figury biegunowe uzyskane na podstawie symulacji MES są bardziej rozmyte niż uzyskane w modelu dwuskalowym, co jednak przemawia na korzyść wyników modelu MES ze względu na ich lepszą zgodność z doświadczeniem.

Rys. 5.36 przedstawia krzywe rzeczywiste naprężenie - rzeczywiste odkształcenie plastyczne (wartości bezwzględne) oraz aktywności systemów i udziały objętościowe bliźniakowania. Krzywe naprężenie-odkształcenie zostały w większości przypadków dość dobrze odwzorowane. Występują istotne różnice w stosunku do wyników symulacji modelem 2SCP (krzywe zielone). Powodem różnic kształtu krzywych jest w niewielkim stopniu obecność odkształceń sprężystych w modelu MES, ale większe znaczenie mają różnice między aktywnościami systemów poślizgu i bliźniakowania przewidywanymi przez oba modele (por. Rys. 3.9). Dla ściskania w kierunku ED w symulacji CPFEM największą aktywność wykazywał poślizg bazalny, podczas gdy w symulacji 2SCP począ-



Rysunek 5.34: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnie przyjętej, i uzyskanej w symulacjach modelem kontynualnym: b) po rozciąganiu, c) po ścisnieniu i d) po rozciąganiu następującym po ścisnieniu.



Rysunek 5.35: Figury biegunowe  $\{0001\}$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{10\bar{1}2\}$  rzutowane na płaszczyznę przekroju poprzecznego próbki wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnie przyjętej i po symulacji b) ściskania 2%, c) ściskania 4%, d) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% prostopadłe do kierunku ED i e) wstępnego ściskania 4% i kolejnego ściskania 3,5% pod kątem  $45^\circ$  do kierunku ED.

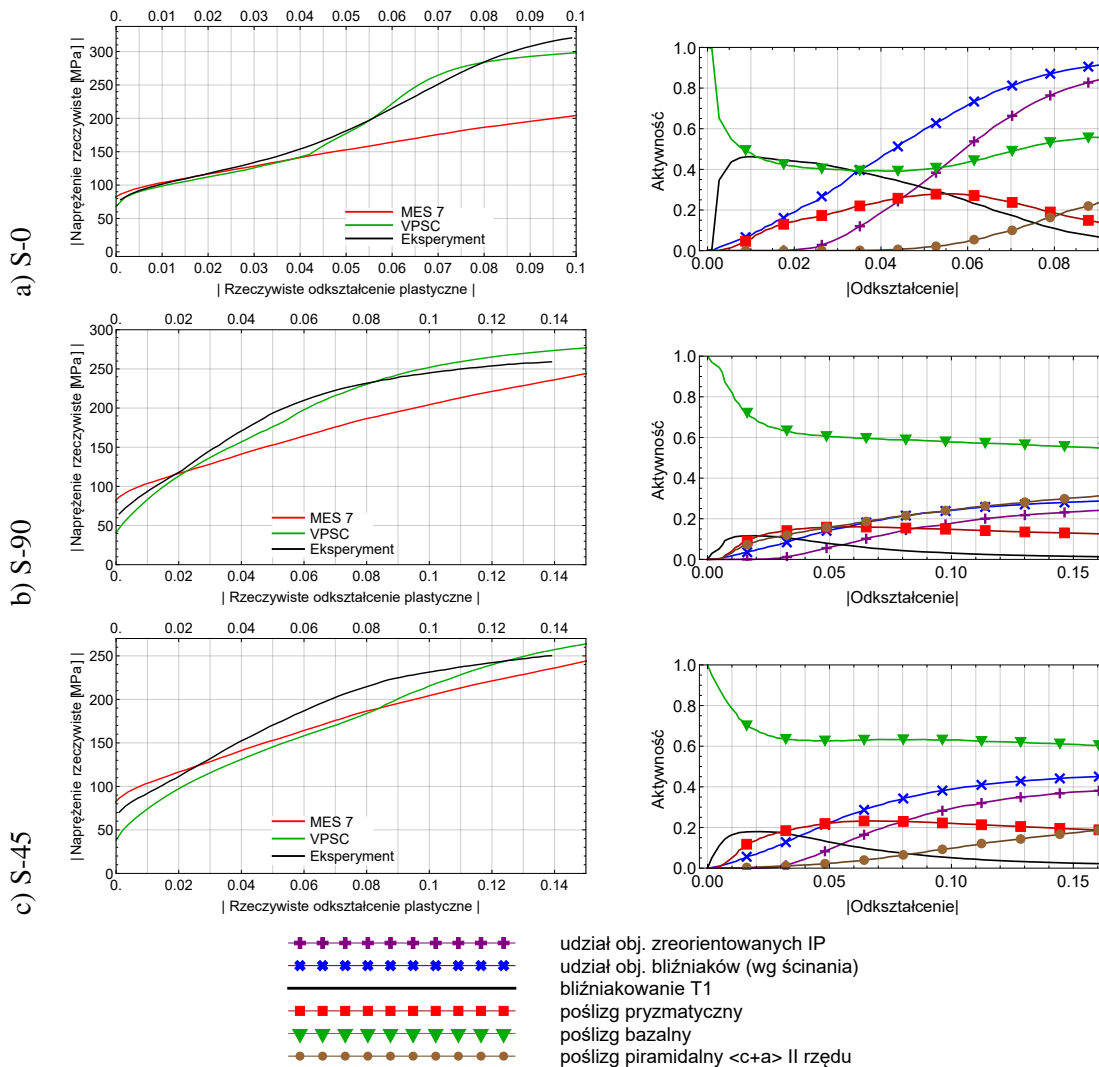
kowo dominujący był pryzmatyczny. W pozostałych próbach aktywności systemów przewidywane przez oba modele są dość podobne (dominujący poślizg bazalny, aktywność poślizgu pryzmatycznego malejąca z czasem na rzecz aktywności poślizgu po płaszczyznach piramidalnych). Z tego powodu również kształt krzywych naprężenie-odkształcenie przewidywanych przez oba modele jest podobny. Wyjątek stanowi symulacja ściskania pod kątem  $90^\circ$  do ED próbki ściskanej wstępnie do poziomu odkształceń plastycznych ok. 4%. W tym wypadku symulacja VPSC przewiduje dominację poślizgu pryzmatycznego na odcinku ok. 6% odkształcenia po zmianie drogi deformacji. Różnice w aktywnościach systemów przekładają się w oczywisty sposób na różnice między kształtami krzywych naprężenie-odkształcenie w obu przypadkach. Należy podkreślić, że przedstawione wyniki modelowania CPFEM mogą ulec zmianie w momencie przeprowadzenia optymalizacji parametrów materiałowych zawartych w Tabeli 5.1 dla kontynualnego modelu MES polikryształu.

## 5.4 Symulacja procesu ECAP dla stopu AZ31b

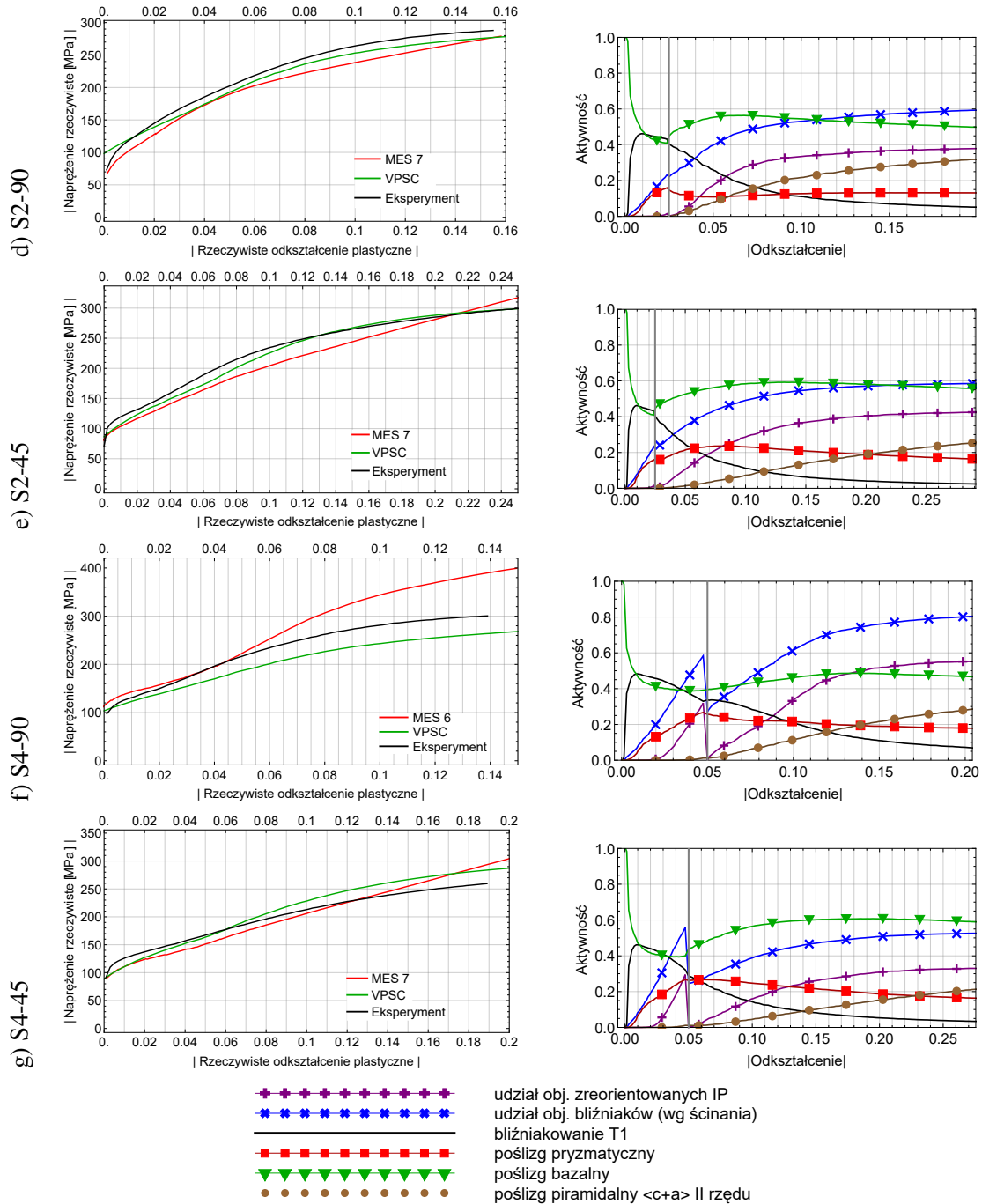
Przeprowadzono symulację procesu ECAP dla stopu AZ31b w celu porównania wyników z danymi eksperymentalnymi (Gu et al., 2013) oraz wynikami symulacji modelem dwuskalowym VPSC (por. sekcja 3.3.3). Symulację przeprowadzono wg podobnego schematu, jak w sekcji 3.3.3, rozkładając jedno przejście przez kanał na dwa quasi-przejścia. W symulacji zadano gradient deformacji  $\bar{\mathbf{F}}$  uzyskany przez obrócenie gradientu deformacji  $\mathbf{F}$  dla prostego ścinania:

$$\bar{F}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2\text{ctg}(\Phi/2) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

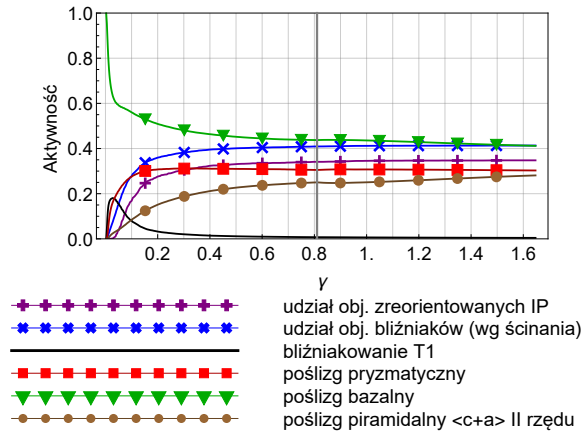
gdzie kąt  $\Phi = 135^\circ$ , por. Rys. 3.29. W pierwszym quasi-przejściu gradient deformacji został obrócony o kąt  $\beta = 180^\circ - 135^\circ = 45^\circ$  w płaszczyźnie ND-ED. W celu symulacji drugiego quasi-przejścia zastosowano podobną procedurę, jak w przypadku symulacji zmiany drogi deformacji w próbach eksperymentalnych dla próbek wyciętych z pręta, mianowicie, sieć krystaliczna w każdym punkcie całkowania została obrócona o kąt  $45^\circ$ . Rys. 5.37 przedstawia aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowane bliźniakowanie (liczone wg ścinania i objętości zreorientowanych obszarów) w symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy ECAP przy użyciu CPFEM. Podobnie jak w symulacji modelem dwuskalowym (por. Rys. 3.30), największą aktywność wykazuje poślizg bazalny, wspomagany przez poślizgi na płaszczyznach pryzmatycznych i piramidalnych  $\langle c+a \rangle$  II rzędu. Bliźniakowanie jest aktywne tylko na początku procesu, co również jest zgodne z symulacją modelem VPSC. Z drugiej strony, uzyskany udział objętościowy bliźniaków w symulacji CPFEM jest dwa razy niższy niż w symulacji VPSC. Rys. 5.38 przedstawia figury biegunowe  $\{0001\}$  i  $\{10\bar{1}0\}$  policzone dla tekstury odpowiednio a) przyjętej wstępnie, b) w trakcie procesu (po jednym quasi-przejściu) i c) po jednym przejściu przez kanał (dwa quasi-przejścia). Porównując wyniki z eksperymentem (por. (Gu et al., 2013) – Rys. 2) i symulacją modelem 2SCP (por. Rys. 3.31) można stwierdzić, że uzyskano dobrą zgodność z doświadczeniem, lepszą niż przypadku modelu 2SCP. Przewaga CPFEM polega głównie na przewidywaniu słabszej tekstury (bardziej rozproszone orientacje), niż w przypadku modelu mikromechanicznego.



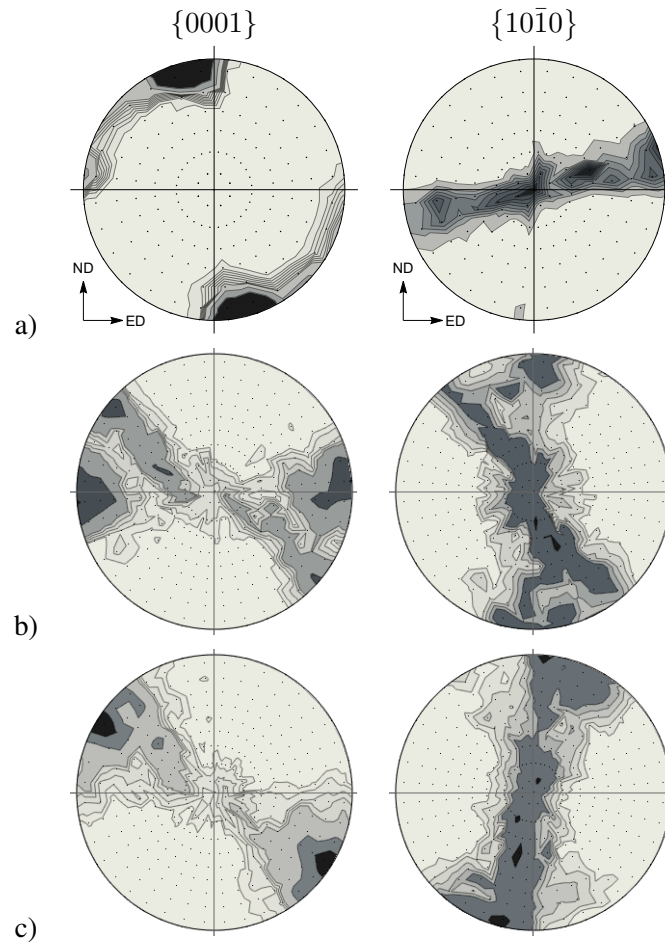
Rysunek 5.36: Porównanie symulowanych krzywych napężenie-odkształcenie i aktywności systemów dla próbek z pręta stopu AZ31b. Lewa kolumna: krzywe napężenie rzeczywiste - rzeczywiste odkształcenie plastyczne uzyskane w próbach eksperymentalnych oraz symulacjach modelem VPSC i MES dla próbek wyciętych z wyciskanego pręta stopu AZ31b. Prawa kolumna: aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowane bliźniakowanie uzyskane w symulacji CPFEM. Wyniki były uzyskane dla: a) ściskania w kierunku wyciskania ED, b) ściskania w kierunku prostopadłym do ED, c) ściskania pod kątem  $45^\circ$  do ED, d) ściskania wstępnie ściskanej (ED 2%) próbki w kierunku prostopadłym do ED, e) ściskania wstępnie ściskanej (ED 2%) próbki pod kątem  $45^\circ$  do ED, f) ściskania wstępnie ściskanej (ED 4%) próbki w kierunku prostopadłym do ED i g) ściskania wstępnie ściskanej (ED 4%) próbki pod kątem  $45^\circ$  do ED.



Rysunek 5.36: Ciąg dalszy.



Rysunek 5.37: Aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania oraz zakumulowane bliźniakowanie (liczone wg ścinania i objętości zreorientowanych obszarów) w symulacji jednego przejścia przez kanał kątowy ECAP przy użyciu CPFEM.



Rysunek 5.38: Figury biegunowe  $\{0001\}$  i  $\{10\bar{1}0\}$  wykonane na podstawie tekstury: a) wstępnie przyjętej do symulacji, b) w trakcie procesu (po jednym quasi-przejściu), c) po jednym przejściu przez kanał (dwa quasi-przejścia).

## Rozdział 6

# Podsumowanie i wnioski

Zastosowane w rozprawie podejście mikromechaniczne pozwala oszacować makroskopową odpowiedź materiału polikrystalicznego przy poprawnym rozpoznaniu mechanizmów deformacji zachodzących na poziomie mikro (pojedynczego ziarna) i zastosowaniu odpowiednich schematów przejścia mikro-makro. W tym kontekście w pracy do opisu zachowania materiału na poziomie lokalnym wykorzystano model plastyczności kryształów deformujących się przez poślizg i bliźniakowanie. W odniesieniu do schematów przejścia mikro-makro w rozprawie zaprezentowane zostały wyniki symulacji przeprowadzonych z użyciem analitycznych modeli mikromechanicznych: dwu- (2SCP) i trójskalowego (3SCP) oraz kontynualnego modelu plastyczności kryształów zaimplementowanego w MES (CPFEM). Na podstawie uzyskanych wyników przeprowadzono szczegółową analizę i dyskusję zdolności wyżej wymienionych modeli do przewidywania ewolucji mikrostruktury w metalach i stopach o wysokiej wytrzymałości właściwej poddanych procesom intensywnej deformacji plastycznej (SPD). Prezentowane rezultaty dotyczyły przewidywania odpowiedzi mechanicznej, rozwoju tekstury krystalograficznej i rozdrobnienia ziaren podczas ściskania i rozciągania, również ze zmianą drogi deformacji, oraz procesów SPD takich jak ECAP i KOBO. Wykazano, że wykorzystywane podejście jest skutecznym narzędziem modelowania wymienionych zjawisk. Biorąc pod uwagę wyniki symulacji można w szczególności stwierdzić, że:

- Zarówno modele oparte na schemacie wewnątrznie zgodnym (2SCP i 3SCP), jak i model kontynualny MES przy odpowiednim dobraniu parametrów są w stanie poprawnie przewidywać rozwój tekstury materiału poddanego deformacji na zmiennych ścieżkach odkształcenia.
- Tekstury przewidywane przez model kontynualny są bliższe wynikom eksperymentalnym niż tekstury otrzymywane przez zastosowanie modelu 2SCP, który przewiduje zbyt silne tekstury. Z kolei w przypadku modelu 3SCP na zmniejszenie poprawności przewidywania tekstury wpływa użycie modelu Taylora.
- Symulacje przy użyciu modelu kontynualnego MES są znacznie bardziej czasochłonne niż symulacje modelem 2SCP (w przypadku przewidywania uśrednionego rozwoju mikrostruktury dla agregatu), jak również są bardziej czasochłonne niż symulacje modelem 3SCP (w przypadku przewidywania rozdrobnienia ziaren).
- Odpowiedź mechaniczna materiału dla obciążeń cyklicznych może zostać określona z większą dokładnością w przypadku modelu kontynualnego z uwagi na uwzględnienie odkształceń sprężystych. W przypadku modelowania rozwoju mikrostruktury w procesach SPD pominięcie odkształceń sprężystych przestaje mieć znaczenie.



- Analityczne modele mikromechaniczne pozwalają na zadanie bardzo skomplikowanych warunków brzegowych (np. wielokrotne przejścia przez kanał ECAP, deformacja w procesie KOBO). Deformacja RVE w procesie ECAP przez zadawanie kolejnych prostych ścinań w sformułowaniu MES może być przeprowadzona poprzez generację nowej siatki elementów skończonych i przekazywanie do niej odpowiednich zmiennych modelu. Zadanie to nie jest trywialne ze względu na konieczność poprawnego przekazania dużej liczby zmiennych modelu plastyczności kryształów oraz odpowiednie rozwiązanie problemu interpolacji wielkości tensorowych.

Do oryginalnych aspektów pracy można zaliczyć:

- Sformułowanie założeń oraz dobór parametrów modelu dwuskalowego dla czystego tytanu deformowanego w podwyższonych temperaturach.
- Sformułowanie procedury identyfikacji i dobór parametrów modelu dwuskalowego stopu AZ31b przy użyciu opracowanej implementacji algorytmu genetycznego oraz wyników badań eksperymentalnych przeprowadzonych w instytucie autora na wyciskanych prętach i walcowanych blachach ze stopu AZ31b.
- Opracowanie metodologii zadawania zmiennych ścieżek deformacji uzyskanych w uproszczonej analizie MES w kodzie VPSC. Zastosowanie modelu dwuskalowego do symulacji rozwoju tekstury czystego technicznie tytanu deformowanego w procesach ECAP i KOBO. Przeprowadzenie analizy wpływu bliźniakowania na rozwój tekstury w tych procesach.
- Zastosowanie zoptymalizowanych parametrów modelu dwuskalowego do symulacji rozwoju tekstury stopu magnezu AZ31b deformowanego w procesie ECAP.
- Sformułowanie oryginalnego modelu trójskalowego oraz jego implementacja. Zastosowanie zaproponowanego podejścia do modelowania ewolucji tekstury i rozdrobnienia ziaren materiałów o sieci A1 i A3. W szczególności opracowanie procedury analizy wyników modelu w przypadku aktywności bliźniakowania.
- Analizę rozdrobnienia ziaren w procesie ECAP dla materiału o sieci A1 z wykorzystaniem modelu trójskalowego. Porównanie rezultatów z dostępnymi w literaturze wynikami badań doświadczalnych.
- Wykorzystanie modelu trójskalowego do analizy rozdrobnienia ziaren w procesie walcowania blach z czystego technicznie tytanu deformującego się przez poślizg i bliźniakowanie. Porównanie rezultatów z dostępnymi w literaturze wynikami badań doświadczalnych.
- Wstępną weryfikację implementacji w MES modelu plastyczności kryształów uwzględniającego bliźniakowanie. Przeprowadzenie symulacji prostych prób eksperymentalnych i procesu ECAP przy użyciu implementacji modelu kontynualnego MES.
- Sformułowanie i implementacja procedur do analizy rozwoju tekstury i powstawania nowych ziaren w procesach intensywnej deformacji plastycznej przy wykorzystaniu wyników kontynualnego modelu MES polikryształu.

Na podstawie analizy wyników przedstawionych w rozprawie wyłaniają się kierunki dalszych badań:

- W celu lepszego przewidywania odpowiedzi mechanicznej materiałów poddanych deformacjom cyklicznym za pomocą analitycznych modeli mikromechanicznych należy w nich uwzględnić odkształcenia sprężyste. Planowane jest wykonanie tego zadania we współpracy z Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux w Metz we Francji (Czarnota et al., 2015).
- Symulacje procesów SPD (np. kolejnych przejść przez kanał ECAP) za pomocą modelu kontynualnego mogą być przeprowadzone poprzez generację nowej siatki i przekazywanie do niej zmiennych modelu. Najprostszą możliwością przekazywania zmiennych jest ich przekazywanie między najbliższymi położonymi punktami całkowania starej i nowej siatki. Wykonano wstępną implementację takiej procedury. Bardziej dokładną metodą jest interpolacja zmiennych między punktami całkowania, która w przypadku CPFEM nie może być wykonana przez liczenie zwykłych średnich ważonych wielkości tensorowych. Planowane jest wykonanie interpolacji przy użyciu algorytmu sferycznej interpolacji liniowej we współpracy z Modeling and Simulation Group, Institute I: General Materials Properties, Friedrich-Alexander-University of Erlangen-Nürnberg w Erlangen w Niemczech (Prakash et al., 2015).
- Wyniki rozwoju mikrostruktury wewnątrz ziaren są tym dokładniejsze, im dokładniejsze jest odwzorowanie samej mikrostruktury, dlatego planowane jest przeprowadzenie symulacji modelem kontynualnym dla periodycznych teselacji Woronoja z siatką zbudowaną z elementów czworobocznych. Użycie takiej siatki umożliwiłoby uzyskanie płaskich granic ziaren.

# Dodatek

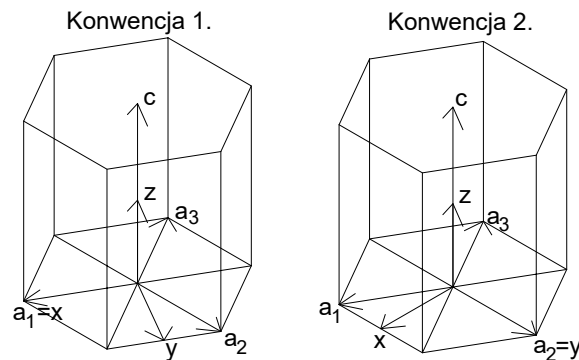
## Konwencje używane w celu rysowania figur biegunowych metali i stopów o sieci A3

Kształt figur biegunowych w przypadku materiałów o sieci A3 zależy od przyjętej konwencji osi ortogonalnego układu współrzędnych. Rys. 1.4b przedstawia układ heksagonalny. Układ ten jest bardzo dogodny do opisu kryształów o sieci A3, ponieważ oddaje on istniejące w takich kryształach symetrie. Niestety układ ten nie jest ortogonalny, dlatego w celu opisu orientacji sieci trzeba dokonać transformacji układu współrzędnych. W oprogramowaniu służącym do rysowania figur biegunowych możliwe są dwie konwencje tej transformacji:

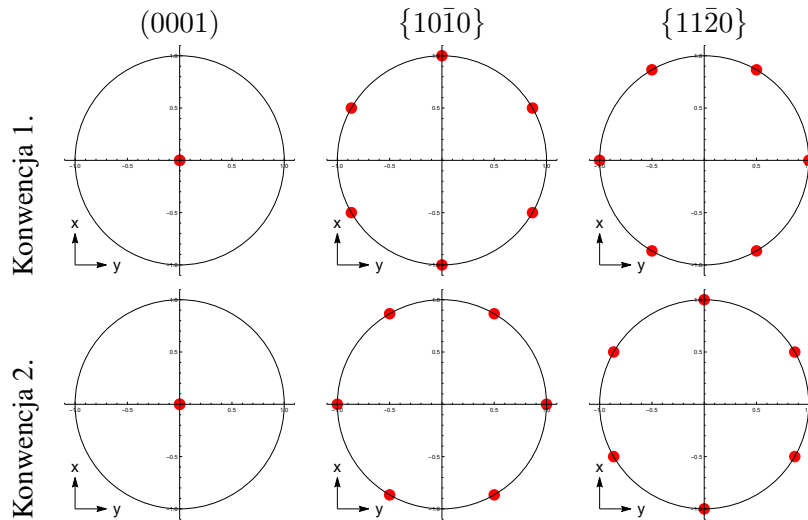
- 1) Oś  $x$  jest równoległa do osi  $a_i$  ( $i = 1, 2, 3$ , wybór  $i$  nie ma znaczenia ze względu na symetrię), por Rys. 6.1a,
- 2) Oś  $y$  jest równoległa do osi  $a_i$ , por Rys. 6.1b.

Oś  $z$  jest zawsze równoległa do osi  $c$  komórki, a niezdefiniowana oś ( $y$  w konwencji 1. i  $x$  w konwencji 2.) jest prostopadła do obu zdefiniowanych osi. Wydaje się, że częściej używaną konwencją jest konwencja 1. Taka konwencja jest używana w programie VPSC oraz w przypadku symulowanych figur biegunowych przedstawionych w tej pracy, chyba, że zaznaczono inaczej.

W celu pokazania znaczenia wyboru konwencji na Rys. 6.2 przedstawione zostały figury biegunowe  $(0001)$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  wykonane dla pojedynczej orientacji opisanej kątami Eulera  $(0, 0, 0)$ . Jak widać wybór konwencji nie ma wpływu na figurę biegunową  $(0001)$ , ponieważ kierunek „ $c$ ” jest w obu konwencjach taki sam. Wybór konwencji ma natomiast bardzo istotny wpływ na figury  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$ , mianowicie prowadzi do ich zamiany. Jak widać, wybór konwencji



Rysunek 6.1: Konwencje używane w celu rysowania figur biegunowych orientacji kryształów o sieci A3.



Rysunek 6.2: Figury biegunowe  $(0001)$ ,  $\{10\bar{1}0\}$  i  $\{11\bar{2}0\}$  dla orientacji  $(0, 0, 0)$  wykonane w obu konwencjach.

jest bardzo istotny i powinien być dokonywany świadomie oraz zaznaczony w publikowanych pracach. Takie podejście pozwoliłoby uniknąć wielu nieporozumień i znacznie ułatwiło porównywanie wyników uzyskiwanych przez różne grupy badaczy.

# Bibliografia

- DREAM.3D Version 4.2, BlueQuartz Software, Springboro, OH, USA, (2013).
- S. R. Agnew i Ö. Duygulu. Plastic anisotropy and the role of non-basal slip in magnesium alloy AZ31B. *Int. J. Plast.*, 21:1161–1193, 2005.
- K. Ahn, H. Huh i J. Yoon. Rate-dependent hardening model for pure titanium considering the effect of deformation twinning. *Int. J. of Mech. Sci.*, 98:80–92, 2015.
- D. J. Alexander. New methods for severe plastic deformation processing. *J. Mater. Eng. Perform.*, 16(3):360–374, 2007.
- L. Anand i M. Kothari. A computational procedure for rate independent crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(4):525–558, 1996.
- M. Ardeljan, R. J. McCabe, I. J. Beyerlien i M. Knezevic. Explicit incorporation of deformation twins into crystal plasticity finite element models. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 295: 396–413, 2015.
- R. J. Asaro. Crystal plasticity. *J. Appl. Mech.*, 50:921–934, 1983.
- R. J. Asaro i A. Needleman. Textured development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta metall.*, 33(6):923–953, 1985.
- F. Barbe, S. Forest i G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 2: Results. *Int. J. Plast.*, 17(4):537–563, 2001.
- Z. S. Basiński, M. S. Szczerba, M. Niewczas, J. D. Embury i S. J. Basinski. The transformation of slip dislocations during twinning of copper-aluminum alloy crystals. *Rev. Metall.*, 94:1037–1043, 1997.
- B. Beausir, S. Biswas, D. I. Kim, L. S. Tóth i S. Suwas. Analysis of microstructure and texture evolution in pure magnesium during symmetric and asymmetric rolling. *Acta Mater.*, 57(17): 5061–5077, 2009.
- M. Berveiller i A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to the plastically flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 26:325, 1979.
- J. Besson, G. Cailletaud, J. L. Chaboche, S. Forest i M. Blétry. *Non-Linear Mechanics of Materials, volume 167 of Solid mechanics and its applications*. Springer, Dordrecht, 2010.
- I. J. Beyerlein i L. S. Tóth. Texture evolution in equal-channel angular extrusion. *Progress Mater. Sci.*, 54:427–510, 2009.

- I. J. Beyerlein, R. A. Lebensohn i C. N. Tomé. Modeling texture and microstructural evolution in the equal channel angular extrusion process. *Mater. Sci. Eng. A*, 345:122–138, 2003.
- Y. Beygelzimer. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: mathematical simulation. *Mech. Mater.*, 37:753–767, 2005.
- N. Bozzolo, N. Dewobroto, H. R. Wenk i F. Wagner. Microstructure and microtexture of highly cold-rolled commercially pure titanium. *J. Mater. Sci.*, 42(7):2405–2416, 2007.
- D. M. Brunette, P. Tengvall, M. Textor i P. Thomsen. *Titanium in medicine: material science, surface science, engineering, biological responses and medical applications*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- J. Cheng i S. Ghosh. A crystal plasticity FE model for deformation with twin nucleation in magnesium alloys. *Int. J. Plast.*, 67:148 – 170, 2015.
- G. Y. Chin, W. F. Hosford i D. R. Mendorf. Accomodation of constrained deformation in f.c.c. metals by slip and twinning. *Proc. R. Soc. A*, 309:433–456, 1969.
- J. W. Christian i S. Mahajan. Deformation twinning. *Prog. Mater. Scie*, 39:1–157, 1995.
- Y. B. Chun, S. H. Yu, S. L. Semiatin i S. K. Hwang. Effect of deformation twinning on microstructure and texture evolution during cold rolling of cp-titanium. *Mater. Sci. Eng.: A*, 398(1):209–219, 2005.
- B. Clausen, C. N. Tomé, D. W. Brown i S. R. Agnew. Reorientation and stress relaxation due to twinning: Modeling and experimental characterization for Mg. *Acta Mater.*, 56:2456–2468, 2008.
- C. Czarnota, K. Kowalczyk-Gajewska, A. Salahouelhadj, M. Martiny i S. Mercier. Modeling of the cyclic behavior of elastic–viscoplastic composites by the additive tangent Mori–Tanaka approach and validation by finite element calculations. *Int. J. Solids Struct.*, 56–57:96–117, 2015.
- O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier i G. Cailletaud. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and study of stress and strain fields near grain boundaries. *Int. J. Plast.*, 21:691–722, 2005.
- H. Ding i Y. C. Shin. Dislocation density-based grain refinement modeling of orthogonal cutting of commercially pure titanium. In *ASME 2011 International Manufacturing Science and Engineering Conference*, pages 89–98. American Society of Mechanical Engineers, 2011.
- H. Ding, N. Shen i Y. C. Shin. Predictive modeling of grain refinement during multi-pass cold rolling. *J. Mater. Proc. Technol.*, 212(5):1003–1013, 2012.
- S. X. Ding, C. P. Chang i P. W. Kao. Effects of processing parameters on the grain refinement of magnesium alloy by equal-channel angular extrusion. *Metall. Mater. Trans. A*, 40(2):415–425, 2009.
- B. J. Duggan, E. C. H. Lim, G. L. Liu, R. K. Ray i A. K. Singh. *Textures in materials research*. Oxford & IBH Publishing, New Delhi, 1999.
- M. K. Duszek-Perzyna i P. Perzyna. Analysis of anisotropy and plastic spin effects on localization phenomena. *Arch. Appl. Mech.*, 68:352–374, 1998.

- A. Dziubińska, A. Gontarz, M. Dziubiński i M. Barszcz. The forming of magnesium alloy forgings for aircraft and automotive applications. *Advances in Science and Technology Research Journal*, 10(31):158–168, 2016.
- N. A. Enikeev, M. F. Abdullin, A. A. Nazarov i I. J. Beyerlein. Modelling grain refinement in fcc metals during equal-channel angular pressing by route „C”. *Int. J. Mater. Res.*, 98:167–171, 2007.
- Y. Estrin, L. S. Tóth, A. Molinari i Y. Bréchet. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation. *Acta mater.*, 46:5509–5522, 1998.
- A. Fernández, M. T. Pérez Prado, Y. Wei i A. Jérusalem. Continuum modeling of the response of a Mg alloy AZ31 rolled sheet during uniaxial deformation. *Int. J. Plast.*, 27:1739 – 1757, 2011.
- R. B. Figueiredo i T. G. Langdon. Grain refinement and mechanical behavior of a magnesium alloy processed by ECAP. *J. Mater. Sci.*, 45(17):4827–4836, 2010.
- K. Frydrych i K. Kowalczyk-Gajewska. A three-scale crystal plasticity model accounting for grain refinement in fcc metals subjected to severe plastic deformations. *Mater. Sci. Eng.: A*, 658:490 – 502, 2016.
- J.-J. Fundenberger i B. Beausir. JTEX - Software for Texture Analysis. 2015. URL <http://jtex-software.eu/>.
- W. Gambin. Plasticity of crystals with interacting slip systems. *Enging. Trans.*, 39(3–4):303–324, 1991.
- W. Gambin. Refined analysis of elastic–plastic crystals. *Int. J. Solids Struct.*, 29(16):2013–2021, 1992.
- S. Graff, W. Brocks i D. Steglich. Yielding of magnesium: From single crystal to polycrystalline aggregates. *Int. J. Plast.*, 23:1957–1978, 2007.
- C. F. Gu, L. S. Tóth, D. P. Field, J. J. Fundenberger i Y. D. Zhang. Room temperature equal-channel angular pressing of a magnesium alloy. *Acta Mater.*, 61:3027–3036, 2013.
- M. Z. Gzyl, A. Rosochowski, A. Milenin i L. Olejnik. Modelling microstructure evolution during equal channel angular pressing of magnesium alloys using cellular automata finite element method. *Comput. Meth. Mater. Sci.*, 13(2):357–363, 2013.
- E. Hadasik, D. Kuc, G. Niewielski i R. Śliwa. Rozwój stopów magnezu do przeróbki plastycznej. *Hutnik, Wiadomości Hutnicze*, Vol. 76, nr 8:580–584, 2009.
- E. O. Hall. The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results. *Proc. Phys. Soc. B*, 64(9):747, 1951.
- T. Hama i H. Takuda. Crystal-plasticity finite-element analysis of inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet. *Int. J. Plast.*, 27:1072–1092, 2011.
- T. Hama, Y. Tanaka, M. Uratani i H. Takuda. Deformation behavior upon two-step loading in a magnesium alloy sheet. *International Journal of Plasticity*, 82:283 – 304, 2016.
- N. Hansen, X. Huang i D. A. Hughes. Microstructural evolution and hardening parameters. *Mater. Sci. Eng. A*, 317:3–11, 2001.

- R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 13:89–101, 1965a.
- R. Hill. A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13:213–222, 1965b.
- R. Hill i J. R. Rice. Constitutive analysis of elastic–plastic crystals at arbitrary strain. *J. Mech. Phys. Solids*, 20:401–413, 1972.
- X. Huang. Grain Orientation Effect on Microstructure in Tensile Strain Copper. *Scripta mater.*, 38:1697–1703, 1998.
- D. A. Hughes i N. Hansen. High Angle Boundaries Formed by Grain Subdivision Mechanisms. *Acta mater.*, 45:3871–3886, 1997.
- J. W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 348:101–127, 1976.
- A. Jäger, V. Gärtnerova i K. Tesař. Microstructure and anisotropy of the mechanical properties in commercially pure titanium after equal channel angular pressing with back pressure at room temperature. *Mater. Sci. Eng.: A*, 644:114–120, 2015.
- M. Janeček, M. Popov, M. G. Krieger, R. J. Hellmig i Y. Estrin. Mechanical properties and microstructure of a Mg alloy AZ31 prepared by equal-channel angular pressing. *Mater. Sci. Eng.: A*, 462(1):116–120, 2007.
- S. R. Kalidindi. Incorporation of twinning in crystal plasticity models. *J. Mech. Phys. Solids*, 46:267–290, 1998.
- I. Karaman, H. Sehitoglu, A. J. Beaudoin, Y. I. Chumlyakov, H. J. Maier i C. N. Tomé. Modeling the deformation behavior of Hadfield steel single and polycrystals due to twinning and slip. *Acta Mater.*, 48:2031–2047, 2000.
- M. Kawasaki, Z. Horita i T. G. Langdon. Microstructural evolution in high purity aluminum processed by ECAP. *Mater. Sci. Eng. A*, 524:143–150, 2009.
- D.-K. Kim, J.-M. Kim, W.-W. Park, H. W. Lee, Y.-T. Im i Y.-S. Lee. Three-dimensional crystal plasticity finite element analysis of microstructure and texture evolution during channel die compression of IF steel. *Comput. Mater. Sci.*, 100:52–60, 2015.
- M. Knezevic, B. Drach, M. Ardeljan i I. J. Beyerlein. Three dimensional predictions of grain scale plasticity and grain boundaries using crystal plasticity finite element models. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 277:239 – 259, 2014.
- A. Korbel i W. Bochniak. KOBO type forming: forging of metals under complex conditions of the process. *J. Mater. Proc. Technol.*, 134:120–134, 2003.
- J. Korelc. Multi-language and multi-environment generation of nonlinear finite element codes. *Eng. with Comput.*, 18:312–327, 2002.
- J. Korelc. Automation of Primal and Sensitivity Analysis of Transient Coupled Problems. *Comput. Mech.*, 44:631–649, 2009.



- K. Kowalczyk i W. Gambin. Model of plastic anisotropy evolution with texture-dependent yield surface. *Int. J. Plast.*, 20:19–54, 2004.
- K. Kowalczyk-Gajewska. Modelling of texture evolution in metals accounting for lattice reorientation due to twinning. *Eur. J. Mech. Solids/A*, 29:28–41, 2010.
- K. Kowalczyk-Gajewska. Micromechanical modelling of metals and alloys of high specific strength. *IFTR Reports 1/2011*, pages 1–299, 2011.
- K. Kowalczyk-Gajewska. Crystal plasticity models accounting for twinning. *Comput. Meth. Mater. Sci.*, 13:436–451, 2013.
- K. Kowalczyk-Gajewska, S. Stupkiewicz, K. Frydrych i H. Petryk. Modelling of Texture Evolution and Grain Refinement on Complex SPD Paths. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 63:012040, 2014.
- K. Kowalczyk-Gajewska, K. Sztwiertnia, J. Kawalko, K. Wierzbowski, K. Wroński, K. Frydrych, S. Stupkiewicz i H. Petryk. Texture evolution in titanium on complex deformation paths: Experiment and modelling. *Mater. Sci. Eng. A*, 637:251–263, 2015.
- E. Kröner. *Kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen*, volume 5. Springer, 1958.
- S. Kucharski, S. Stupkiewicz i H. Petryk. Surface Pile-Up Patterns in Indentation Testing of Cu Single Crystals. *Exper. Mech.*, 54(6):957–969, 2014.
- D. Kuhlmann-Wilsdorf. "Regular" Deformation Bands (DBs) and The LEDS Hypothesis. *Acta Mater.*, 47:1697–1712, 1999.
- T. G. Langdon. The principles of grain refinement in equal-channel angular pressing. *Mater. Sci. Eng. A*, 462:3–11, 2007.
- R. Lapovok, Y. Estrin, M. V. Popov i T. G. Langdon. Enhanced superplasticity in a magnesium alloy processed by equal-channel angular pressing with a back-pressure. *Advanced Engineering Materials*, 10(5):429–433, 2008.
- R. A. Lebensohn i C. N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: Application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater.*, 41:2611–2624, 1993.
- R. A. Lebensohn, P. R. Dawson, H. M. Kern i H.-R. Wenk. Heterogeneous deformation and texture development in halite polycrystals: comparison of different modeling approaches and experimental data. *Tectonophysics*, 370(1):287–311, 2003.
- R. A. Lebensohn, Y. Liu i P. Ponte Castañeda. On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations. *Acta Mater.*, 52:5347–5361, 2004.
- R. A. Lebensohn, R. Brenner, O. Castelnau i A. D. Rollett. Orientation image-based micromechanical modelling of subgrain texture evolution in polycrystalline copper. *Acta Materialia*, 56(15): 3914 – 3926, 2008. ISSN 1359-6454.
- E. H. Lee. Elastic–plastic deformation at finite strains. *J. Appl. Mech.*, 36(1), 1969.

- T. Leffers. A model for rolling deformation with grain subdivision. Part I: The initial stage. *Int. J. Plasticity*, 17:469–489, 2001a.
- T. Leffers. A model for rolling deformation with grain subdivision. Part II: The subsequent stage. *Int. J. Plasticity*, 17:491–511, 2001b.
- J. Lévesque, K. Inal, K. W. Neale, R. K. Mishra i A. A. Luo. Numerical modelling of large strain deformation in magnesium. *Magnesium Technology 2006*, pages 239–244, 2006.
- J. Lévesque, K. Inal, K. W. Neale i R. K. Mishra. Numerical modeling of formability of extruded magnesium alloy tubes. *Int. J. Plast.*, 26(1):65–83, 2010.
- H. Li, D. E. Mason, T. R. Bieler, C. J. Boehlert i M. A. Crimp. Methodology for estimating the critical resolved shear stress ratios of  $\alpha$ -phase Ti using EBSD-based trace analysis. *Acta Mater*, 61: 7555–7567, 2013.
- S. Li, I. J. Beyerlein i M. A. M. Bourke. Texture formation during equal channel angular extrusion of fcc and bcc materials: comparison with simple shear. *Mater. Sci. Eng., A* 394:66–77, 2005.
- T. Libura, Z. L. Kowalewski, L. Dietrich i G. Socha. Anti-buckling system for flat specimens investigations under cyclic tension-compression. *Materials Today: Proceedings*, 3(4):1045 – 1050, 2016a. ISSN 2214-7853. 32nd DANUBIA ADRIA SYMPOSIUM on Advanced in Experimental Mechanics.
- T. Libura, Z. L. Kowalewski, K. Kowalczyk-Gajewska i L. Dietrich. Low cycle fatigue of a rolled magnesium alloy using anti-buckling fixture. In *Dynamic behaviour of materials and its applications in industrial processes*, pages 1–3, 2016b.
- P. Lipiński, J. Krier i M. Berveiller. Elastoplasticite des metaux en grandes deformations: Comportement global et evolution de la structure interne. *Rev Phys. Appl.*, 25:361, 1990.
- L. Madej, L. Rauch, K. Perzyński i P. Cybulka. Digital material representation as an efficient tool for strain inhomogeneities analysis at the micro scale level. *Arch. Civ. Mech. Eng.*, XI:661–679, 2011.
- S. Mahesh i C. N. Tomé. Deformation banding under arbitrary monotonic loading in cubic metals. *Phil. Mag.*, 84:3517–3546, 2004.
- R. Masson, M. Bornert, P. Suquet i A. Zaoui. An affine formulation for the prediction of the effective properties of non-linear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:1203–1227, 2000.
- T. Mayama, M. Noda, R. Chiba i M. Kuroda. Crystal plasticity analysis of texture development in magnesium alloy during extrusion. *Int. J. Plast.*, 27:1916–1935, 2011.
- D. P. Mika i P. R. Dawson. Effects of grain interaction on deformation in polycrystals. *Mater. Sci. Eng. A*, 257(1):62 – 76, 1998.
- A. Molinari, G. R. Canova i S. Ahzi. Self-consistent approach of the large deformation polycrystal visco-plasticity. *Acta Metall.*, 35:2983–2994, 1987.
- A. Morawiec. *Orientations and Rotations. Computations in Crystallographic Textures*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2004.

- B. L. Mordike i T. Ebert. Magnesium: Properties - applications - potential. *Mater. Sci. Eng. A*, A302:37–45, 2001.
- T Mura. *Micromechanics of defects in solids. Mechanics of Elastic and Inelastic Solids*, vol. 3. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1987.
- A. A. Nazarov, N. A. Enikeev, A. E. Romanov, T. S. Orlova, I. V. Alexandrov, I. J. Beyelein i R. Z. Valiev. Analysis of substructure evolution during simple shear of polycrystals by means of a combined viscoplastic self-consistent and disclination modeling approach. *Acta Mater.*, 54:985–995, 2006.
- S. Nemat-Nasser, W. G. Guo i J. Y. Cheng. Mechanical properties and deformation mechanisms of a commercially pure titanium. *Acta Mater.*, 47(13):3705–3720, 1999.
- H. Numakura i M. Koiwa. Dislocations in metals and alloys with the hexagonal close-packed structure. *Metall. Sci. and Technol.*, 16(1-2), 1998.
- M. Ortiz i E. A. Repetto. Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 36:286–351, 1999.
- S. J. Park, H. N. Han, K. H. Oh, D. Raabe i J. K. Kim. Finite element simulation of grain interaction and orientation fragmentation during plastic deformation of bcc metals. In *Materials Science Forum (Switzerland)*, volume 408, pages 371–376, 2002.
- N. J. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *J. Iron Steel Inst.*, 174:25–28, 1953.
- H. Petryk. Incremental energy minimization in dissipative solids. *C. R. Mecanique*, 331:469–474, 2003.
- H. Petryk i M. Kurasa. The energy criterion for deformation banding in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 61:1854–1875, 2013.
- H. Petryk i M. Kurasa. Incremental work minimization algorithm for rate-independent plasticity of single crystals. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 61:1854–1875, 2015.
- H. Petryk i S. Stupkiewicz. A quantitative model of grain refinement and strain hardening during severe plastic deformation. *Mater. Sci. Eng. A*, 444:214–219, 2007.
- H. Petryk i S. Stupkiewicz. Modelling of microstructure evolution on complex paths of large plastic deformation. *Int. J. Mat. Res.*, 103:271, 2014.
- H. Petryk, S. Stupkiewicz i S. Kucharski. On direct estimation of hardening exponent in crystal plasticity from the spherical indentation test. *Int. J. Solids Struct.*, 112:209 – 221, 2016.
- A. Prakash i R. A. Lebensohn. Simulation of micromechanical behavior of polycrystals: finite elements versus fast Fourier transforms. *Model. Simul. Mater. SC*, 17(6):1–16, 2009.
- A. Prakash, W. G. Nohring, R. A. Lebensohn, H. W. Hoppel i E. Bitzek. A multiscale simulation framework of the accumulative roll bonding process accounting for texture evolution. *Mater. Sci. Eng.: A*, 631:104 – 119, 2015.
- G. Proust, C. N. Tomé, A. Jain i S. R. Agnew. Modeling the effect of twinning and detwinning during strain-path changes of magnesium alloy AZ31. *Int. J. Plast.*, 25:861–880, 2009.

- K. Przybyłowicz. *Podstawy teoretyczne metaloznastwa*. Wydawnictwa Naukowo–Techniczne, Warszawa, 1999.
- R. Quey, P.R. Dawson i F. Barbe. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 200(17-20):1729 – 1745, 2011.
- D. Raabe, Z. Zhao i W. Mao. On the dependence of in-grain subdivision and deformation texture of aluminum on grain interaction. *Acta Mater.*, 50(17):4379 – 4394, 2002.
- F. Roters, P. Eisenlohr, T. R. Bieler i D. Raabe. *Crystal Plasticity Finite Element Methods*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2010.
- G. Sachs. Plasticity problems in metals. *Z. Verein Deutscher Ingenieure*, 72:734, 1928.
- A. A. Salem, S. R. Kalidindi, R. D. Doherty i S. L. Semiatin. Strain hardening due to deformation twinning in  $\alpha$ -Titanium: Mechanisms. *Metal. Mater. Trans. A*, 37A:259–268, 2006.
- V. M. Segal. *Methods of Stress-Strain Analysis in Metalforming*. Sc.D. Thesis, Minsk, 1979.
- V. M. Segal. Materials processing by simple shear. *Mater. Sci. Eng. A*, 197:157–164, 1995.
- V. M. Segal. Equal channel angular extrusion: from macromechanics to structure formation. *Mater. Sci. Eng. A*, 271:322–333, 1999.
- K. Shoemake. Animating rotation with quaternion curves. In *SIGGRAPH'85 Proceedings of the 12th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*, pages 245–254, 1985.
- T. Skippon, C. Mareau i M. R. Daymond. On the determination of single-crystal plasticity parameters by diffraction: optimization of a polycrystalline plasticity model using a genetic algorithm. *Journal of Applied Crystallography*, 45(4):627–643, Aug 2012.
- E. A. De Souza Neto, D. Peric, M. Dutko i D. R. J. Owen. Design of simple low order finite elements for large strain analysis of nearly incompressible solids. *Int J Solid Struct*, 33(20):3277 – 3296, 1996.
- A. Staroselsky i L. Anand. A constitutive model for hcp materials deforming by slip and twinning: application to magnesium alloy AZ31B. *Int. J. Plast.*, 19:1843–1864, 2003.
- A. Staroselsky i L. Anand. Inelastic deformation of polycrystalline face centered cubic materials by slip and twinning. *J. Mech. Phys. Solids*, 46:671–696, 1998.
- C. W. Su, L. Lu i M. O. Lai. A model for the grain refinement mechanism in equal channel angular pressing of Mg alloy from microstructural studies. *Mater. Sci. Eng.: A*, 434(1–2):227 – 236, 2006.
- M. J. Szczerba, S. Kopacz i M. S. Szczerba. Detwinning of face-centered cubic deformation twins via the correspondence matrix approach. *Acta Mater.*, 102:162, 2016.
- G. I. Taylor. Plastic strain in metals. *Journal of Institute of Metals*, 62:307–324, 1938.
- C. N. Tomé i R. A. Lebensohn. Manual for Code Visco-Plastic Self-Consistent (VPSC). Version 7b. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 2007.

- C. N. Tomé, R. A. Lebensohn i U. F. Kocks. A model for texture development dominated by deformation twinning: application to zirconium alloy. *Acta Metal. Mater.*, 39:2667–2680, 1991.
- L. S Tóth, A. Molinari i Y. Estrin. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model. *Journal of engineering materials and technology*, 124(1):71–77, 2002.
- L. S. Tóth, B. Beausir, C. F. Gu, Y. Estrin, N. Scheerbaum i C. H. J. Davies. Effect on grain refinement by severe plastic deformation on the next-neighbour misorientation distribution. *Acta Mater.*, 58:6706–6716, 2010a.
- L. S. Tóth, Y. Estrin, R. Lapovok i C. Gu. A model of grain fragmentation based on lattice curvature. *Acta Mater.*, 58:1782–1794, 2010b.
- R. Z. Valiev, Y. Estrin, Z. Horita, T. G. Langdon, M. J. Zehetbauer i Y. T. Zhu. Producing bulk ultrafine-grained materials by severe plastic deformation. *JOM-WARRENDALE-*, 58:33–39, 2006.
- R. Z. Valiev, I. P. Semenova, V. V. Latysh, A. V. Shcherbakov i E. B. Yakushina. Nanostructured titanium for biomedical applications: New developments and challenges for commercialization. *Nanotechnologies in Russia*, 3(9):593–601, 2008.
- R.Z. Valiev i T. G. Langdon. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement. *Prog. Mater. Sci.*, 51:881–981, 2006.
- P. Van Houtte. Simulation of the rolling texture and shear texture of brass by the Taylor theory adapted for mechanical twinning. *Acta Metal.*, 26:591–604, 1978.
- P. Van Houtte, L. Delannay i I. Samajdar. Quantitative prediction of cold rolling textures in low carbon steel by means of the LAMEL model. *Textures and Microstruct.*, 31:109–149, 1999.
- P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt i L. Delannay. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model. *Int. J. Plast.*, 21:589–624, 2005.
- Y. N. Wang i J. C. Huang. The role of twinning and untwinning in yielding behavior in hot-extruded Mg-Al-Zn alloy. *Acta Mater.*, 55:897–905, 2007.
- D. F. Williams. On the mechanisms of biocompatibility. *Biomaterials*, 29(20):2941–2953, 2008.
- L. Wu, S.R. Agnew, Y. Ren, D.W. Brown, B. Clausen, G.M. Stoica, H.R. Wenk i P.K. Liaw. The effects of texture and extension twinning on the low-cycle fatigue behavior of a rolled magnesium alloy, AZ31B. *Mater. Sci. Eng.: A*, 527(26):7057 – 7067, 2010. ISSN 0921-5093.
- P. D. Wu, Y. Huang i D. J. Lloyd. Studying grain fragmentation in ECAE by simulating simple shear. *Scripta materialia*, 54(12):2107–2112, 2006.
- C. Xu, Z. Horita i T. G. Langdon. Microstructural evolution in an aluminum solid solution alloy processed by ECAP. *Mater. Sci. Eng. A*, 528:6059–6065, 2011.
- D. K. Yang, P. Cizek, P. D. Hodgson i C. E. Wen. Microstructure evolution and nanograin formation during shear localization in cold-rolled titanium. *Acta Mater.*, 58(13):4536–4548, 2010.
- M. H. Yoo. Slip, twinning, and fracture in hexagonal close-packed metals. *Metallurgical Transactions A*, 12(3):409–418, 1981.

- A. Zahedi, A. Roy i V. V. Silberschmidt. Modelling of vibration assisted machining fcc single crystal. *Procedia CIRP*, 31:393–398, 2015.
- Z. Zeng, S. Jonsson i H. J. Roven. The effects of deformation conditions on microstructure and texture of commercially pure Ti. *Acta Mater.*, 57(19):5822–5833, 2009a.
- Z. Zeng, Y. Zhang i S. Jonsson. Deformation behaviour of commercially pure titanium during simple hot compression. *Materials & Design*, 30(8):3105–3111, 2009b.
- D.-F. Zhang, H.-J. Hu, F.-S. Pan, M.-B. Yang i J.-P. Zhang. Numerical and physical simulation of new SPD method combining extrusion and equal channel angular pressing for AZ31 magnesium alloy. *T. Nonferr. Metal. Soc.*, 20(3):478–483, 2010.
- J. Zhang i S. P. Joshi. Phenomenological crystal plasticity modeling and detailed micromechanical investigations of pure magnesium. *J. Mech. Phys. Solids*, 60:945–972, 2012.
- S. V. Zherebtsov, G. S. Dyakonov, A. A. Salem, S. P. Malysheva, G. A. Salishchev i S. L. Semiatin. Evolution of grain and subgrain structure during cold rolling of commercial-purity titanium. *Mater. Sci. Eng.: A*, 528(9):3474–3479, 2011.
- S. V. Zherebtsov, G. S. Dyakonov, A. A. Salem, V. I. Sokolenko, G. A. Salishchev i S. L. Semiatin. Formation of nanostructures in commercial-purity titanium via cryorolling. *Acta Mater.*, 61(4):1167–1178, 2013.
- Y. Zhong, F. Yin i K. Nagai. Role of deformation twin on texture evolution in cold-rolled commercial-purity Ti. *Journal of Materials Research*, 23(11):2954–2966, 2008.