

TÉCNICAS DE ELEMENTOS FINITOS Y MODELOS POLICRISTALINOS APLICADOS AL DESARROLLO DE TEXTURAS EN CU-FE

J. W. Signorelli, A. L. Fourty, M. Bertinetti, P. Turner, R. Lebensohn, R. E. Bolmaro

Instituto de Física Rosario - Fac. de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - UNR - CONICET. 27 de Febrero 210 bis, 2000
Rosario, Argentina

e-mail: fourty@ifir.ifir.edu.ar - bolmaro@ifir.ifir.edu.ar

Los modelos policristalinos han demostrado ser una herramienta eficaz para la predicción del desarrollo de texturas. La presencia de más de una fase requiere considerar la interacción entre ambas dado que co-deforman elástica y plásticamente. Una primera aproximación consiste en la utilización de un modelo viscoplastico autoconsistente de 1 sitio (1-SSC). Una aproximación más realista se logra a través de la extensión al modelo autoconsistente de 2 sitios (2-SSC), el cual agrega a la aproximación de campo medio un término adicional dependiente de la interacción local de primeros vecinos. El siguiente nivel de complejidad es la incorporación de este modelo (2-SSC) en programas de elementos finitos a fin de lograr una completa integración entre las diversas escalas: microscópica, mesoscópica y escala de la pieza. En esta comunicación un modelo viscoplastico 2-SSC es utilizado como ecuación constitutiva de un programa de elementos finitos 3D. El código resultante es aplicado a la predicción de texturas de trefilado en frío en un bifásico 25%Cu-75%Fe. La simulación se realiza partiendo de un estado microestructural definido (textura cristalográfica y morfológica). Los resultados obtenidos reproducen cualitativamente las texturas experimentales pero los ajustes cuantitativos son mas bien pobres. La inhomogeneidad del proceso de deformación aparenta inducir a través del modelo mayor aleatoriedad en la distribución de orientaciones que la observada experimentalmente.

Polycrystalline models have shown to be powerful tools for prediction of texture developments. When more than one phase is present, it is necessary to take into account the interaction between them, because of their elastic and plastic co-deformation. The first approach is the 1 site viscoplastic selfconsistent model (1-SSC). A more realistic approximation is reached applying the 2-SSC model. This one adds a term to the mean field approximation that depends of the local interaction between closest neighbors. The next step of complexity is to incorporate this model to finite elements codes to obtain a complete integration between the different scales (macroscopic, mesoscopic and of the piece). In this work a viscoplastic 2-SSC model is used as a constitutive equation in a fully 3D finite element code. The resulting code is applied to predict cold drawing textures for a two-phase 25%Cu-75%Fe composite. The simulation is performed starting from a well defined microstructural state (morphologic and crystallographic texture). The results are in good qualitative agreement with the quantitative ones but the quantitative agreement is rather poor. The inhomogeneity of the deformation apparently induces, through the computational model, a randomization process higher than the one observed in the experiments.

Introducción

El desarrollo de texturas de deformación en materiales bifásicos ha sido estudiado en el pasado mediante simulaciones basadas tanto en hipótesis de Taylor como en modelos autoconsistentes de 1 y 2 sitios. La incorporación de interacción elasto-plástica entre un cristal y un medio homogéneo, al estilo de los modelos autoconsistentes, ha traído mejoras en las simulaciones así como en la interpretación de los resultados experimentales⁽¹⁾. Una mejora ulterior de los modelos ha sido obtenida con la incorporación de interacciones con primeros vecinos así como con mecanismos de co-rotación entre cristales⁽²⁻³⁾. De cualquier manera es sabido que los ensayos mecánicos, aun los mejor controlados, presentan inhomogeneidades macroscópicas intrínsecas que pueden oscurecer los resultados experimentales y su análisis basado en simulaciones. El propósito de la presente comunicación es mostrar resultados preliminares de simulaciones basadas en códigos acoplados o híbridos de elementos finitos (FEM) y simulaciones micromecánicas⁽⁴⁻⁵⁾. En el aspecto experimental se presentarán resultados de texturas de

extrusión obtenidos en compuestos Cu-Fe mediante la técnica de difracción de neutrones. En el aspecto teórico se presentarán simulaciones, por técnicas FEM, de extrusión de materiales bifásicos con ecuaciones constitutivas basadas en códigos autoconsistentes viscoplasticos de 1 y 2 sitios. El propósito es obtener, además de las texturas promedio de deformación finales, información acerca de diversos parámetros micromecánicos que permitan evaluar la manera correcta de tratar las rotaciones inducidas por la deformación y la reorientación relativa de cristales cercanos. El debilitamiento de la textura final, debido a la inhomogeneidad macroscópica del ensayo, podrá ser evaluado mediante la simulación de modo de inferir en qué magnitud ese debilitamiento es producto de inhomogeneidades que aparecen a escalas de grano o macroscópica. También se procurará inferir información acerca de los mecanismos de reorientación cristalina.

Experimentos

Los datos experimentales han sido informados "in extenso" en otras presentaciones y se muestran aquí sólo por completitud de los resultados⁽³⁾. La Fig. 1 muestra las

figuras de polos inversas de compuestos de polvos 25%Cu-75%Fe. Las mismas fueron medidas a una deformación equivalente de Von Mises igual a 3.00 en extrudado. Se utilizó la técnica de difracción de neutrones en el FRG-1, Geesthacht, Alemania en el difractor TEX-2. La información experimental fue procesada por diversos métodos de análisis matemático presentes en popLA y Beartex, dos paquetes de software académico-comerciales.

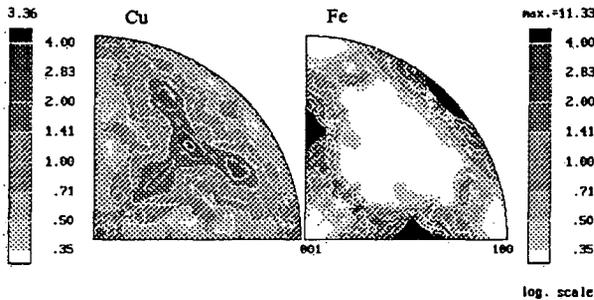


Fig. 1: Figuras de polos inversas experimentales de compuestos de 25%Cu-75%Fe, correspondientes a una deformación equivalente de Von Mises de 3.00 en extrudado.

Simulaciones

El proceso de trefilado fue modelizado haciendo uso de un código de elementos finitos 3D viscoplástico acoplado a un modelo de plasticidad policristalina⁽⁴⁻⁵⁾. La utilización de éste último como ecuación constitutiva permite tener en cuenta mecanismos de la microestructura presentes en el material, los cuales no son adecuadamente descriptos por una ley fenomenológica macroscópica de tipo Norton-Hoff. El método de resolución empleado está basado en la formulación débil o formulación velocidad-presión: v,p. El mismo requiere resolver el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{cases} \forall \mathbf{v}^* \in \mathcal{V} & \int_{\Omega} \mathbf{s} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^* \, dv - \int_{\Omega} \mathbf{p} : \text{div } \mathbf{v}^* \, dv - \int_{\partial\Omega_c} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{v}^* \, ds - \int_{\partial\Omega_r} \mathbf{T} : \mathbf{v}^* \, ds = 0 \\ \forall \mathbf{p}^* \in \mathcal{Q} & \int_{\Omega} \mathbf{p} : \text{div } \mathbf{v}^* \, dv = 0 \end{cases} \quad (1)$$

donde \mathcal{V} y \mathcal{Q} son el espacio de velocidades y presión cinemáticamente admisibles respectivamente. Además

\mathbf{s} : tensor deviatorio de tensiones

$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$: tensor velocidad de deformación

\mathbf{p} : presión \mathbf{v} : vector velocidad

$\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ \mathbf{n} : normal exterior Ω : volumen

Ω_c : sup. de contacto Ω_r : sup. con carga impuesta

El comportamiento del material para un régimen viscoplástico es descrito a través de la siguiente expresión:

$$\mathbf{s} = \mathbf{M}^{-1}[\dot{\boldsymbol{\epsilon}}] : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \quad (2)$$

donde $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ es el tensor macroscópico deviatorio de velocidad de deformación y \mathbf{M} es el módulo del material. En el presente trabajo el módulo viscoplástico del material \mathbf{M} es calculado por medio de un modelo policristalino viscoplástico autoconsistente de 2 sitios⁽²⁾. El comportamiento local (a nivel de grano) es

caracterizado por medio de una ley potencial, que relaciona el esfuerzo aplicado $\boldsymbol{\tau}^s$ en un plano cristalográfico y la tensión crítica de activación de ese sistema τ_c^s dentro del grano. La velocidad de deformación total en el grano es obtenida como suma de las velocidades de deformación de corte simple $\dot{\boldsymbol{\gamma}}^s$ de cada uno de los sistemas de deslizamiento y/o maclado potencialmente activos.

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \left\{ \dot{\boldsymbol{\gamma}}_0 \sum_s \frac{\mathbf{m}^s \otimes \mathbf{m}^s}{\tau_c^s} \left(\frac{\mathbf{m}^s : \mathbf{s}}{\tau_c^s} \right)^{n-1} \right\} \mathbf{s} = \mathbf{M}^{c(sec)}[\mathbf{s}] : \mathbf{s} \quad (3)$$

donde $\mathbf{m}^s = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^s \otimes \mathbf{b}^s + \mathbf{b}^s \otimes \mathbf{n}^s)$ es el tensor de Schmid que describe la geometría del sistema de deslizamiento en el cristal simple, \mathbf{n}^s es la normal al plano de deslizamiento, \mathbf{b}^s es la dirección de deslizamiento y $\dot{\boldsymbol{\gamma}}_0$ es una velocidad de deformación de referencia. El módulo \mathbf{M} del policristal es calculado a través de la relación micro-macro (grano-policristal), en función de la respuesta individual de cada uno de los granos que conforman el agregado policristalino. Como resultado se obtiene una relación implícita en \mathbf{M} , la cual puede ser resumida en la siguiente expresión:

$$\mathbf{M}^{sec} = \left\langle \mathbf{M}_{1,2}^{c(sec)} : \mathbf{B}_{1,2}^c \right\rangle \quad (4)$$

donde $\mathbf{B}_{1,2}^c = \mathbf{B}_{1,2}^c [\mathbf{M}_{1,2}^{c(sec)}, \mathbf{M}_{1,2}^{(sec)}, \mathbf{S}]$

$\mathbf{M}_{1,2}^{c(sec)}$ módulo viscoplástico secante de cristal (grano) del sitio 1 ó 2.

$\mathbf{B}_{1,2}^c$ tensor de "acomodación" viscoplástico del cristal c y sitio 1 ó 2.

\mathbf{S} tensor de Eshelby.

El acople entre el modelo policristalino y el código de elementos finitos consiste en utilizar en la ecuación (2) el módulo viscoplástico calculado por el modelo policristalino (4), y luego resolver el problema de contorno definido en (1), utilizando como ecuación constitutiva la relación siguiente:

$$\mathbf{s} = \mathbf{M}_{poly}^{-1}[\dot{\boldsymbol{\epsilon}}] : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}$$

El código resultante permite calcular el desarrollo de textura en el material a partir de un estado microestructural definido (textura cristalográfica, morfológica, etc.).

La Fig. 2 muestra el mallado utilizado para efectuar 12 extrusiones sucesivas de una deformación equivalente de Von Mises de 0.25 para cada paso hasta acumular una deformación total equivalente de 3.00. Los gradientes de velocidad fueron calculados a lo largo de cada línea de corriente para cada conjunto de elementos representativo de una distancia radial. Las Figs. 3, 4 y 5 muestran las figuras de polos inversas obtenidas mediante la utilización de los gradientes de velocidad obtenidos por FEM a diferentes posiciones en la dirección radial.

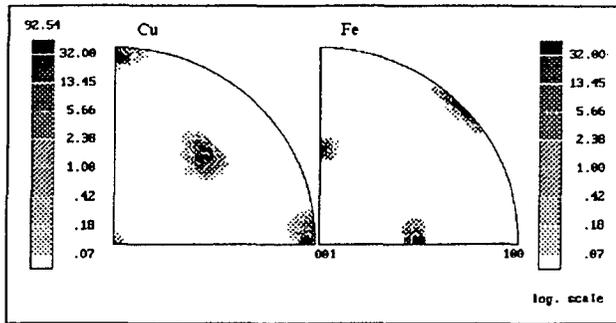


Fig. 3.

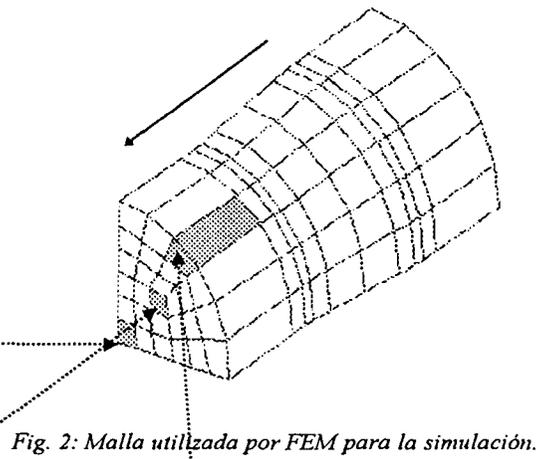


Fig. 2: Malla utilizada por FEM para la simulación.

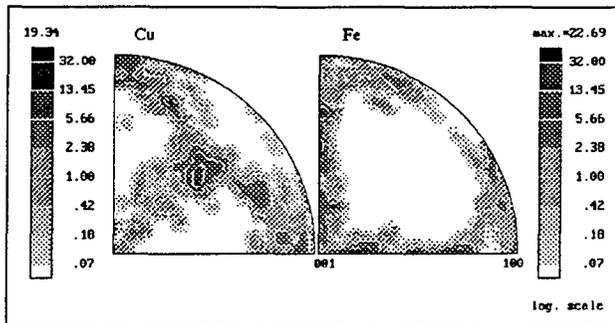


Fig. 4.

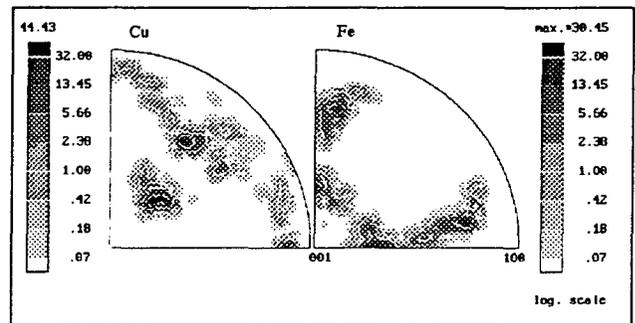


Fig. 5

Fig. 3, 4 y 5: Texturas simuladas de elementos del centro del tubo, a distancia $r/2$ del centro y del borde del tubo respectivamente.

Los sitios representativos de los cristales apareados de distintas fases fueron sometidos alternativamente a las condiciones de rotación independiente y co-rotación descritas en⁽³⁾. Las texturas en las celdas centrales (Fig. 3) muestran las intensidades y características usuales de una textura de extrusión con deformación homogénea, sin componentes de corte, a la misma deformación equivalente. Es de destacar que la severidad de la textura simulada es mucho mayor que las obtenidas experimentalmente lo que es usual en este tipo de simulaciones. La deformación redundante generada por la deformación de corte representa no más del 3% del total en los elementos más externos de la probeta y es totalmente despreciable en los elementos centrales. Las texturas presentadas por los elementos externos han sufrido debilitamientos debido a la combinación de los patrones característicos de las texturas de extrusión pura y corte inducido en los bordes por el proceso de extrudado. La Fig. 6 muestra la textura promedio calculada como superposición de las texturas generadas en todos los elementos finales, con el peso correspondiente a la fracción de volumen que cada uno representa, y considerando las simetrías apropiadas para tener en cuenta los cuatro cuadrantes de la probeta.

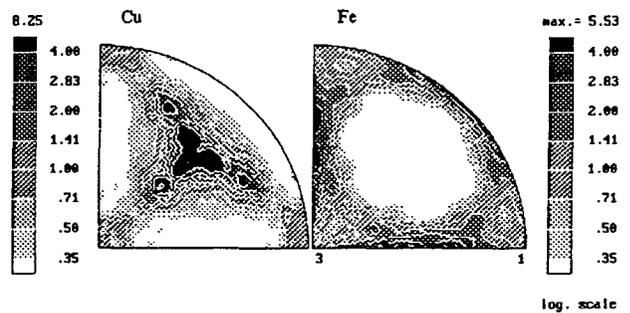


Fig. 6: Textura promedio simulada calculada como superposición de las texturas generadas en todos los elementos finales.

Conclusiones

Las texturas desarrolladas presentan las simetrías (o su ausencia) esperadas en cada caso. En los elementos exteriores las intensidades se ven disminuidas debido al proceso de cambio de paso de deformación producido por la componente antisimétrica del gradiente de velocidad. No obstante, el mayor debilitamiento de las intensidades de las texturas se produce como consecuencia de las superposiciones de los distintos patrones producto de los diferentes gradientes de velocidad sufridos por los

diferentes elementos. Es sorprendente la baja intensidad de las texturas promedio conseguidas por simulación, independientemente del modelo autoconsistente utilizado (1 sitio, 2 sitios, con o sin co-rotación, etc.). De estos resultados podría inferirse que las inhomogeneidades inducidas por el ensayo son suficientes para explicar la gran disminución de los valores experimentales. Más aun, son difíciles de compatibilizar con las texturas medidas que se muestran mucho más intensas que las simuladas. Se hace necesario una revisión de las suposiciones básicas del código de elementos finitos así como de los mecanismos microscópicos de deformación y reorientación utilizados.

Referencias

- 1.- A. Molinari, G.R. Canova and S. Ahzi, *Acta metall.*, **35** (1987) 2983.
- 2.- R.A. Lebensohn and G.R. Canova. *Acta mater.*, **45**, 9 (1997) 3687-3694.
- 3.- R.E. Bolmaro, R.A. Lebensohn and H.-G. Brokmeier. *Comp. Mat. Sc.*, **9** (1997) 237-250.
- 4.- A.J. Beaudoin, P.R. Dawson, K.K. Mathur and U.F. Kocks. *Int. J. of Plasticity*, **11**, 5 (1995) 501-521.
- 5.- T. Auhurst, S. Tjotta, H. Vatne and P. Van Houtte. *Int. J. of Plast.*, **13**, 1-2 (1997) 111.