

MODELADO DEL EFECTO DE TAMAÑO DE GRANO A TRAVÉS DEL CONCEPTO DE DISLOCACIONES GEOMÉTRICAMENTE NECESARIAS

Javier W. Signorelli^a, Claudio D. Schwindt^{a,b}, Analía Roatta^a

^a*Grupo de Física y Micromecánica de Materiales Heterogéneos, Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario, Bv. 27 de Febrero 210b, Rosario, Argentina – CONICET, roatta@ifir-conicet.gov.ar, signorelli@ifir-conicet.gov.ar*

^b*Departamento de Ingeniería, Universidad Nacional del Sur, Avenida Alem 1253 - Bahía Blanca(8000FTN), Argentina - CONICET, claudio.schwindt@uns.edu.ar*

Palabras claves: Plasticidad cristalina, Dislocaciones geoméricamente necesarias, Efecto de tamaño de grano

Resumen. La deformación plástica en agregados policristalinos metálicos muestra una dependencia clara con la textura cristalográfica del material, así como con el tamaño de grano y su morfología. Mientras que el primer factor ha sido extensamente tratado en la literatura, la dependencia con el tamaño de grano requiere aún investigación. La heterogeneidad en la deformación plástica observada en agregados policristalinos metálicos implica la generación, aniquilación e interacción de dislocaciones en una forma compleja. La formulación propuesta diferencia dos tipos de densidades de dislocaciones: almacenadas estadísticamente (SSDs), las cuales se caracterizan por no tener efectos netos sobre la curvatura de red y aquellas estructuras de dislocaciones con efectos netos en la curvatura de la red cristalina, denominadas dislocaciones geoméricamente necesarias (GNDs). Observaciones 2D a partir de mapas obtenidos por EBSD muestran una distribución fuertemente heterogénea a través de todo el policristal, con altos valores de densidad de GND en borde de grano, y formaciones de subestructura en el interior de los mismos. En el presente trabajo se describe la evolución de la densidad de dislocaciones de tipo SSD utilizando una ley clásica que combina efectos de creación y aniquilación de dislocaciones. El efecto de GND se estima por medio del tensor de densidad de dislocaciones de Nye, el cual es evaluado a partir de la curvatura de la red cristalina ya sea en forma experimental o a partir del campo orientacional, obtenido como resultado de la simulación. La presencia de GND en el modelo induce efectos no-locales en la formulación. A nivel mesoscópico (RVE) el problema se trata mediante una aproximación de campo completo basada en el empleo de funciones de Green y de la transformada rápida de Fourier (FFT). A nivel constitutivo se emplea una ley de plasticidad cristalina viscoplástica.

Se discuten los casos de aplicación y validación realizados asumiendo un RVE 2D de una material cúbico de estructura BCC. Se muestra la variación en la respuesta mecánica de un grano al modificarse su entorno y/o tamaño. La capacidad predictiva del modelo es confrontada con mediciones sobre chapas de acero (AKDQ) de 1mm de espesor y una distribución inicial de tamaño de grano en el rango de 10 a 30 μm bajo diferentes sollicitaciones de expansión biaxiales.

1 INTRODUCCIÓN

El proceso de deformación plástica en metales policristalinos es por naturaleza un proceso heterogéneo. Durante la deformación plástica se forman bordes de alto ángulo por acumulación de dislocaciones en el interior del grano originando desorientaciones intragranulares, las cuales finalmente producen una subdivisión del grano en dominios de menor tamaño y orientación diferente. La distribución de estas estructuras no es aleatoria sino que frecuentemente presentan una orientación privilegiada, como es el caso de procesos de laminado (Liu et al., 1998). Un punto siempre vigente es la capacidad de obtener una cantidad medible y una métrica cuantificable de la microestructura observada, es decir poder definir el estado microestructural del material. La estructura de dislocaciones se describe en términos de dos clases de distribución de dislocaciones: dislocaciones estadísticamente distribuidas (SSD –statistically stored dislocations-) y dislocaciones geoméricamente necesarias (GND –geometrically necessary dislocations-). Estas últimas contribuyen a la curvatura y fragmentación de la red cristalina (Nye, 1953; Ashby, 1970). Si bien es aceptado que la componente de GND es relativamente pequeña respecto de la densidad total de dislocaciones, no obstante su efecto puede impactar significativamente en ciertos estados de deformación observados del material (Ma et al., 2006). Actualmente, gracias a la mejora y conjunción del poder de resolución de nuevos microscopios FEG-SEM (-Field Emission Guns-Scanning Electron Microscope-) con alta velocidad de adquisición y procesamiento de la indexación, los sistemas de EBSD (-Electron Back Scattering Diffraction-) posibilitan caracterizar la distribución de orientaciones cristalográficas de la muestra o determinar con gran precisión la variación espacial de la orientación cristalina en dominios de pocos granos. Consecuentemente, el conocimiento del campo orientacional (2D) nos habilita a estimar la densidad de GND a partir de la evaluación de las componentes accesibles del tensor densidad de dislocaciones de Nye, las cuales a su vez, quedan determinadas por la curvatura de red compatible con el campo orientacional medido. Altos valores de GND son asociados a proximidades de borde de grano, o interfaces entre fases de alto contraste en deformación, como el caso de aceros de doble fase (Hughes et al., 2003).

Los modelos desarrollados para capturar estos aspectos de la microestructura requieren ser aproximaciones altamente locales, incluir aspectos estadísticos de la estructuras de dislocaciones, y aún así no garantizan la obtención de un marco de trabajo adecuado. A medida que el tamaño de grano disminuye o la estructura de dislocaciones desarrollada se hace más marcada, el efecto de tamaño adquiere un protagonismo importante. Típicamente, los modelos para el cristal simple basado en la plasticidad cristalina del continuo (Asaro, 1983; Busso, 1990; Kalidindi et al., 1992) dependen de variables internas asociadas a los sistemas de deslizamiento para describir el estado de tensión local del material. En el caso que la variable interna esté relacionada con la densidad de dislocaciones SSD, se suele incluir una longitud característica relacionada con el camino libre medio entre dislocaciones. Sin embargo, la experiencia muestra una dependencia con el gradiente espacial cuando el tamaño del dominio geométrico o la longitud característica de la microestructura fuerza el desarrollo de la deformación en regiones menores a $5\mu\text{m}$ – $10\mu\text{m}$ en el caso de materiales policristalinos o de $0.1\mu\text{m}$ – $1\mu\text{m}$ en el caso de monocristales. A medida que se definen las estructuras de dislocaciones, las GNDs promueven un continuo incremento de la desorientación de los subbordes de grano, lo cual hace necesario tratar el problema de endurecimiento y fragmentación de granos en forma simultánea y dando lugar a efectos de tamaño. Diversos modelos de plasticidad de gradiente han sido desarrollados con el fin de capturar dichos efectos incorporando una longitud característica en forma analítica en la formulación de la

plasticidad empleada (Aifantis, 1987; Fleck et al., 1994.; Gao et al., 1999; Dai, 1997; Gurtin, 2002 entre otros). Una característica común a estos trabajos, basados en implementaciones en elementos finitos, es la limitación de las microestructuras investigadas debido al alto número de grados de libertad involucrados en el problema. Una alternativa eficiente a la resolución por elementos finitos lo constituye el empleo de formulaciones similares a las técnicas de procesamiento de imágenes basadas en algoritmos FFT (-Fast Fourier Transform-), propuestos originalmente por Moulinec and Suquet, (1994) para predecir el comportamiento micromecánico de materiales heterogéneos. Posteriormente la formulación es extendida al caso de policristales viscoplástico no lineales por Lebensohn, (2001); Lebensohn et al., 2004a, b, 2005 y 2008).

El objetivo del presente trabajo es mostrar la factibilidad de incluir efectos de tamaño utilizando el concepto de GND conjuntamente con un modelo viscoplástico de plasticidad cristalina basado en transformada rápida de Fourier. En la sección 2 se detalla la relación entre la curvatura de red y el tensor densidad de dislocaciones; a continuación, sección 3, se describe brevemente la relación constitutiva asumida y la formulación FFT. En la sección 4 se analiza el efecto de tamaño de grano e interacción entre granos como caracterización del modelo implementado. Finalmente en la sección 5 se presenta un ejemplo de aplicación en aceros de bajo carbono.

Notación: los tensores de 2^{do} y 4^{to} orden se notan con negrita, vectores sin negrita y escalares e índices en *italica*.

2 DENSIDAD DE DISLOCACIONES

Diferentes metodologías han sido exploradas para introducir el efecto de las GND en la descripción constitutiva de materiales. En particular, nos interesa la posibilidad de resolver el campo de GND a partir de medidas convencionales de EBSD. El tensor de densidad de dislocaciones α introducido por Nye (Nye, 1953) se expresa en términos del vector de Burgers b , el vector de línea l , indicando la dirección del desplazamiento producido por la dislocación, y el vector posición x^t :

$$\alpha_{ij} = \sum_t b_i^t l_j^t \delta(x - x^t) \quad (1)$$

Asumiendo compatibilidad, Kröner, (Kröner, 1955) muestra la relación entre el tensor densidad de dislocaciones y la distorsión geométrica de la red cristalina:

$$\alpha^T = -rotor(\beta^{el}) = rotor(\beta^{pl}), \quad \alpha_{ik} = -\varepsilon_{klj} \frac{\partial \beta_{ij}^{el}}{\partial x_l} \quad (2)$$

donde β^{pl} y β^{el} son los tensores de distorsión plástica y elástica, respectivamente, siendo este último la suma de la deformación elástica ε_{ij}^{el} y del tensor de rotación de red ω_{ij} . Simplificando, en ausencia de deformación elástica y expresando el tensor de rotación de red mediante el vector de rotación se llega

$$\alpha_{ij} = -\varepsilon_{jkl} \omega_{il,k} = -\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ilm} \omega_{m,k} = \omega_{j,i} - \delta_{ij} \omega_{k,k} \quad (3)$$

lo cual permite relacionar el tensor curvatura de red con el vector de rotación, $k_{ji} = \omega_{j,i}$, obteniéndose la relación original de Nye:

$$\alpha_{ij} = k_{ji} - \delta_{ij} k_{kk}. \quad (4)$$

Es precisamente el tensor de curvatura de red el que nos permite establecer una relación entre el tensor densidad de dislocaciones y campo de orientaciones cristalinas. El conocimiento espacial de las orientaciones locales nos permite derivar la curvatura de red a partir de la

diferencia en la rotación de red de dos puntos contiguos en la medición (He et al., 2008):

$$\Delta\omega = \theta r = \frac{2 \cos^{-1} \Delta q_0}{\sqrt{1 - \Delta q_0^2}} \Delta q \approx 2\delta q, \quad \theta \ll 1 \quad (5)$$

lo cual permite aproximar el tensor de curvatura en términos del cambio espacial del vector desorientación Δq (expresado como quaternion):

$$k_{kl} = \frac{\partial \omega_k}{\partial x_l} \approx 2 \frac{\Delta q_k}{\Delta x_l}, \quad (k = 1, 2, 3) \quad (6)$$

donde Δx_l representa la distancia en la dirección l entre dos puntos desorientados Δq . De la fórmula anterior queda claro que, dado que los mapas de EBSD dan necesariamente una información parcial del campo de orientaciones (2D), resulta sólo posible estimar 6 de las 9 componentes del tensor curvatura de red, y con éstas sólo 5 de las componentes del tensor densidad de dislocaciones:

$$\begin{aligned} \alpha_{12} = k_{21}; \quad \alpha_{13} = k_{31}; \quad \alpha_{21} = k_{12}; \quad \alpha_{23} = k_{32}; \\ \alpha_{33} = -k_{11} - k_{22}. \end{aligned} \quad (7)$$

Finalmente, es necesario introducir una medida aproximada o densidad de dislocaciones aparente ρ^* para caracterizar la densidad total de GND, o más estrictamente, densidad de dislocaciones inducida por curvatura de red (CID):

$$\rho^* = \frac{1}{b} \|\alpha\| = \frac{1}{b} (|\alpha_{12}| + |\alpha_{13}| + |\alpha_{21}| + |\alpha_{23}| + |\alpha_{33}|). \quad (8)$$

Si bien es posible generalizar la expresión anterior al caso de materiales donde los sistemas de deformación activos presenten diferentes vectores de Burgers, por simplicidad se restringe el análisis a materiales cúbicos con un único valor de dicho vector.

3 MODELO

Las simulaciones son realizadas utilizando un modelo viscoplástico de plasticidad cristalina (VP-FFT). La formulación FFT permite resolver el problema -exacto- de equilibrio de tensión y compatibilidad en deformación en una celda unitaria periódica. El método originalmente propuesto y desarrollado para materiales compuestos por Moulinec and Suquet, 1994, 1998 y Michel et al., 2000 es posteriormente extendido al caso de materiales policristalinos viscoplásticos por Lebensohn, 2001; Lebensohn et al., 2004, 2008. Recientemente ha sido extendido a materiales elasto-viscoplástico por Lebensohn et al., 2012, y a deformaciones finitas por Eisenlohr et al., 2013. A continuación se realiza una breve descripción de la ley constitutiva así como de la formulación FFT empleadas.

3.1 Ley constitutiva

A nivel local el comportamiento constitutivo del material se describe por medio de una ecuación no lineal de tipo potencial. Asumiendo que la componente plástica de deformación es mucho mayor que la contribución elástica y que el medio es incompresible tenemos:

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \mathbf{m}^k(\mathbf{x}) \dot{\gamma}^k(\mathbf{x}) = \dot{\gamma}_0 \sum_{k=1}^N \mathbf{m}^k(\mathbf{x}) \left(\frac{|\mathbf{m}^k(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x})|}{\tau_c^k(\mathbf{x})} \right)^n \text{sgn}(\mathbf{m}^k(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{x})) \quad (9)$$

donde el símbolo ‘:’ indica doble contracción de índices y la suma se realiza sobre los N sistemas de deslizamiento del material. Los términos τ_c^k y $\mathbf{m}^k = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^k(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{b}^k(\mathbf{x}) + \mathbf{b}^k(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}^k(\mathbf{x}))$ son el valor de tensión crítica de activación y la parte simétrica del tensor de Schmid asociados al

sistema k , respectivamente. \mathbf{n}^k y \mathbf{b}^k representan la normal al plano de deslizamiento y la dirección del vector de Burgers del sistema k . Los tensores $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ y $\boldsymbol{\sigma}'$ son la velocidad de deformación deviatoria y la tensión deviatoria; $\dot{\gamma}^k$ es la velocidad de corte simple aportada por el sistema k , y $\dot{\gamma}_0$ es un factor de normalización.

La rotación de la red cristalográfica está dada por:

$$\dot{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \mathbf{q}^k(\mathbf{x}) \dot{\gamma}^k(\mathbf{x}) \quad (10)$$

donde $\mathbf{q}^k = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^k(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{b}^k(\mathbf{x}) - \mathbf{b}^k(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}^k(\mathbf{x}))$ es la parte antisimétrica del tensor de Schmid.

3.2 Formulación VP-FFT

El policristal se representa por medio de una celda unitaria periódica, la cual se discretiza en $2^{N1} \times 2^{N2} \times 2^{N3}$ puntos regulares \mathbf{x}^k , los cuales se corresponden con una grilla de similares características en el espacio de Fourier $\boldsymbol{\xi}^k$. La solución del problema consiste en ajustar iterativamente un campo de velocidades de deformación compatible, relacionado a un campo equilibrado de tensiones a través de un determinado potencial constitutivo, de forma tal de minimizar el promedio de la tasa de trabajo plástico. Se asume que la respuesta mecánica local de un medio heterogéneo puede ser calculada como una integral de convolución entre la función de Green con un adecuado campo lineal de referencia y el campo real heterogéneo. Dada la periodicidad del medio, la integral de convolución puede ser transformada en un producto en el espacio de Fourier, lo cual facilita su resolución y finalmente antitransformar para volver al espacio real.

En forma análoga a lo que se realiza en la resolución de la relación constitutiva local en el problema autoconsistente (Lebensohn and Tomé, 1993) se establece una relación entre el desvío (\sim) en tensión de Cauchy y el correspondiente desvío en velocidad de deformación:

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\mathbf{x}) = L_{ijkl}^0 \tilde{\epsilon}_{kl}(\mathbf{x}) + \varphi_{ij}(\mathbf{x}) + \tilde{\sigma}^m(\mathbf{x}) \delta_{ij} \quad (11)$$

$$\varphi_{ij}(\mathbf{x}) = \tilde{\sigma}'_{ij}(\mathbf{x}) - L_{ijkl}^0 \tilde{\epsilon}_{kl}(\mathbf{x}),$$

donde \mathbf{L}^0 es un tensor de 4° orden que caracteriza el medio lineal de referencia; φ define el tensor de polarización y σ^m es el campo de presiones hidrostático.

A partir de la Ec. (11), junto con las condiciones de equilibrio de tensiones e incompresibilidad y utilizando la relación $\tilde{\epsilon}_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\tilde{v}_{i,j}(\mathbf{x}) + \tilde{v}_{j,i}(\mathbf{x}))$ se llega a:

$$\begin{cases} L_{ijkl}^0 \tilde{v}_{k,lj}(\mathbf{x}) + \tilde{\sigma}'_{i,j}(\mathbf{x}) + \varphi_{ij,j}(\mathbf{x}) = 0 \\ \tilde{v}_{k,k}(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (12)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales resultante puede tratarse utilizando el formalismo de funciones de Green. Si la función G_{km} es la función de Green periódica asociada al campo de velocidad v_k , la solución de la Ec. (12) es la integral de convolución entre la correspondiente función de Green y el campo de polarización.

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{x}) = \dot{E}_{ij}(\mathbf{x}) + FFT^{-1}\{\hat{\Gamma}_{ijkl}^{sym}(\boldsymbol{\zeta}) \hat{\varphi}_{kl}(\boldsymbol{\zeta})\}(\mathbf{x}), \quad (13)$$

donde $\Gamma_{ijkl}^{sym} = sim(G_{ik,jl})$ y FFT^{-1} representa la inversa de la transformada de Fourier. Los tensores $\hat{\varphi}_{kl}$ y $\hat{\Gamma}_{ijkl}^{sym}$ son sólo función de las propiedades del medio \mathbf{L}^0 y $\hat{\cdot}$ indica que se hallan definidos en el espacio de Fourier. Detalles de la formulación y del algoritmo de resolución, incluido el procedimiento basado en los multiplicadores de Lagrange para garantizar convergencia, pueden verse en Lebensohn et al., 2008.

3.3 Endurecimiento VP-FFT-CID

La densidad total de dislocaciones en cada sistema de deslizamiento, ρ_T^k , se descompone en término de las dislocaciones almacenadas estadísticamente ρ_{SSD}^k y aquellas estructuras de dislocaciones con efectos netos en la curvatura de la red cristalina ρ_{GND}^k . La tensión crítica al avance del deslizamiento puede relacionarse con la densidad de dislocaciones en la forma:

$$\tau_c^k = \tau_0 + \alpha G b \sqrt{\sum_{s=1}^N H_{SSD}^{ks} \rho_{SSD}^s + H_{GND} \rho_{GND}} \quad (14)$$

donde τ_0 es el valor de tensión crítica inicial, α, G y b son un coeficiente del material, el módulo de rigidez y el módulo del vector de Burgers, respectivamente. La matriz H_{SSD}^{ks} representa la interacción entre sistemas de deslizamiento, discriminando por tipo de dislocación en el caso de dislocaciones SSD y H_{GND} es un factor de peso en la contribución de ρ_{GND} .

3.3.1 Dislocaciones SSD

La evolución de la densidad de dislocaciones ρ_{SSD}^k está basada en la relación de Orowan y en el proceso de aniquilación de dipolos (Essmann and Mughrabi, 1979) y adopta la forma siguiente:

$$\dot{\rho}_{SSD}^k = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^k} - 2Y_c \rho_T^k \right) |\dot{\gamma}^k| \quad (15)$$

donde Y_c es un parámetro proporcional a la distancia característica del proceso de aniquilación de dipolos de dislocaciones y L^k es el camino libre medio de la densidad de dislocaciones del sistema k , el cual puede expresarse como:

$$L^k = K \left(\sum_{s \neq k}^N a \rho_{SSD}^s \right)^{-1/2} \quad (16)$$

siendo K un parámetro que caracteriza la interacción entre dislocaciones SSD. El coeficiente a discrimina sistema coplanar sin interacción ($a=0$) del resto ($a=1$) (Harder, 1999).

3.3.2 Dislocaciones GND

Como se mencionó en la sección 2, la contribución de las dislocaciones GND puede ser estimada evaluando la curvatura de la red cristalina y el tensor densidad de dislocaciones de Nye. A diferencia del caso de un campo de orientaciones obtenido por EBSD (2D), en la simulación se dispone de información en las 3 direcciones espaciales pudiendo evaluar todas las componentes del tensor de Nye. La implementación de las leyes de evolución de las tensiones críticas se realiza en forma explícita, es decir una vez lograda la convergencia al cabo de cada paso incremental de deformación se procede a actualizar los valores de τ_c^k para todos los sistemas de deslizamiento en cada una de las celdas en que se ha discretizado el RVE. En esta forma, la estimación de GND contempla sólo un cálculo geométrico en el espacio de orientaciones. Si bien, la descripción de la textura del material utiliza ángulos de Euler, es interesante en este caso, emplear el formalismo ángulo-eje y cuaterniones. La orientación de la red informada como eje de rotación unitario \hat{r} y ángulo de desorientación ω , con respecto a algún sistema de referencia, puede combinarse en un cuaternión cuyo álgebra resulta útil para llevar a cabo los cálculos que proponemos. Así:

$$\mathbf{q} = (q_0, \vec{q}) = \left(\cos \frac{\omega}{2}, r \sin \frac{\omega}{2} \right) \quad (17)$$

La diferencia de orientación entre dos orientaciones A y B se calcula mediante $\Delta \mathbf{q} =$

$q_A^{-1}q_B$. Dado que se refiere a la desorientación entre dos puntos de una red cristalina es necesario incluir las simetrías propias del cristal en el análisis. Representando por el operador \mathbf{S} al conjunto de simetrías de la estructura cristalina considerada, todas las descripciones simétricamente equivalentes de una dada desorientación, son:

$$\Delta q = q_A^{-1} \mathbf{S}_A^{-1} \mathbf{S}_B q_B = q_A^{-1} \mathbf{S} q_B \quad (18)$$

Entre todas las desorientaciones equivalentes se selecciona la que corresponde al ángulo mínimo $\theta = \min_{s \in S} \{\cos^{-1} \Delta q_0^s\}$. Ahora bien, ya sea que tratemos el problema bidimensional (medidas obtenidas por EBSD) o tridimensional (cálculos realizados sobre un RVE) es necesario explicitar el criterio que se adopta respecto de cómo se evalúa la desorientación entre puntos adyacentes. Una primera e importante suposición que se hace es asumir que dentro del grano o dominio la distribución de orientaciones, g , se describe mediante una función continua y hay un gradiente de orientaciones dentro del mismo:

$$g(x) = \{g(x) \mid \forall x \in a \text{ un dado grano/dominio}\} \quad (19)$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{m(x, x+\Delta x)}{\Delta x} = 0,$$

siendo m una función que describe la desorientación entre dos orientaciones situadas en x y $x+\Delta x$. Tanto los datos medidos como los simulados son de naturaleza discreta, es decir se dispone de una distribución discreta, en nuestro caso regular, dependiente sólo del tamaño de la grilla elegida. En este sentido la Ec. (19) adopta la forma:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow \delta} \frac{m(x, x+\Delta x)}{\Delta x} = \theta, \quad (20)$$

donde δ es el tamaño espacial de la discretización. En el caso particular de una grilla regular rectangular, la identificación de la desorientación se realiza en la dirección de los 4 ó 6 (análisis bi o tridimensional) puntos vecinos más próximos. En función de esta consideración, una vez que se dispone de la orientación para cada punto del dominio, se adopta el siguiente criterio:

$$\begin{aligned} \theta(x_i, x_j) &\leq \theta^{crit}. \\ \theta(x_i, x_j) &= m(g(x_i), g(x_j)) \end{aligned} \quad (21)$$

donde x_i, x_j y θ^{crit} son las posiciones de dos puntos adyacentes y el ángulo de desorientación crítico, respectivamente. Al incluir las simetrías en el análisis se obtiene:

$$\begin{aligned} q^s(x) &= q(x) \mathbf{S}_s, \quad s = 1, \dots, S \\ q^{res}(x) &= q^s(x) \text{ si } \min \left\{ \Delta q \left(q^j(x), q^s(x) \right) \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

S determina el conjunto de S orientaciones cristalográficamente equivalentes; $q^j(x), j = 1, \dots, 4$ o $j = 1, \dots, 6$ según sea bidimensional o tridimensional identifica los cuaterniones de las orientaciones vecinas al cuaternión $q(x)$. El cuaternión $q^{res}(x)$ es el que se retiene para caracterizar la orientación en la posición x .

Una vez reducidos todos los cuaterniones, se procede a evaluar la desorientación, con las Ecs. (6) y (4) se determina la curvatura de red y el tensor densidad de dislocaciones. Finalmente, se evalúa la densidad de dislocaciones aparente ρ^* ó ρ_{GND} . Nótese que se ha omitido explícitamente la dependencia de ρ_{GND} del sistema de deslizamiento, esto constituye una limitación en la forma del modelo propuesto ya que no permite diferenciar la contribución de los diferentes sistemas de deslizamiento en el término de ρ_{GND} .

4 CARACTERIZACIÓN DEL MODELO

Las simulaciones desarrolladas en la presente sección corresponden a un material cúbico con estructura BCC. Se asume que la deformación plástica es consecuencia del deslizamiento sobre planos y direcciones cristalográficos, $\{110\}\langle 111\rangle$, $\{112\}\langle 111\rangle$ típicos en estos materiales, con un valor de $n=20$ para el exponente de la ley potencial y $\dot{\gamma}_0 = 1s^{-1}$, (Ec. (9)). La actualización morfológica se realiza adoptando un criterio tipo Taylor, es decir, sólo se habilita una distorsión homogénea de la topología inicial. Los parámetros asociados a las leyes de evolución de la densidad de dislocaciones SSD y de endurecimiento se muestran en la Tabla 1. Se verificó, en todos los casos, que la tolerancia de convergencia esté en el rango 10^{-2} - 10^{-3} utilizando un paso de deformación de $\Delta\varepsilon = 0.0025$

K	a	ρ_0	b	Y_C	τ_0	α	G
15	1.0	$1e12\text{ m}^{-2}$	$2.56e-10\text{ m}$	$4.55e-08\text{ m}$	11 MPa	0.5	54200 MPa

Tabla 1: Parámetros usado en la simulación.

A continuación se discute el modelo implementado analizando su capacidad de describir efectos de tamaño de grano, interacción con granos vecinos, morfología y orientación cuando el material es sometido a un laminado ideal.

4.1 Efecto Hall-Petch

Para analizar la influencia del tamaño de grano, bajo una sollicitación de deformación plana o laminado ideal, se define un RVE pseudo-2D discretizado en $256 \times 256 \times 2$ celdas. Sólo una de las 2 celdas en espesor corresponde al material en estudio, la restante se utiliza para evitar la periodicidad del material asumiendo una fase vacía (esta estrategia evita la descripción de granos columnares). En la Figura 1 se muestran los RVE utilizados. El empleo de celdas de $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$ determina un tamaño de los RVEs de $256\mu\text{m} \times 256\mu\text{m}$, conteniendo 4, 16, 64 y 256 granos respectivamente, donde a cada grano se le asigna en forma aleatoria una orientación cristalina homogénea de partida.

La Figura 2 muestra la respuesta tensión-deformación en función de la inversa de la raíz cuadrada del tamaño medio del grano para los cuatro RVEs descritos.

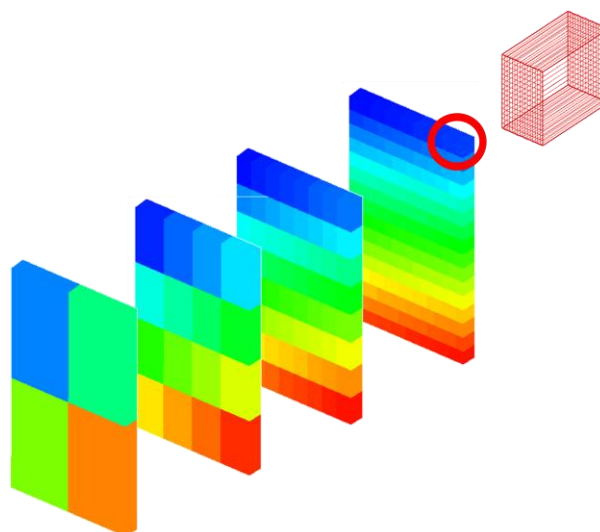


Figura 1: Configuraciones de RVEs multigrano con tamaño de grano decreciente. De izquierda a derecha: 4, 16, 64 y 256 granos. Los colores indican diferentes orientaciones cristalográficas.

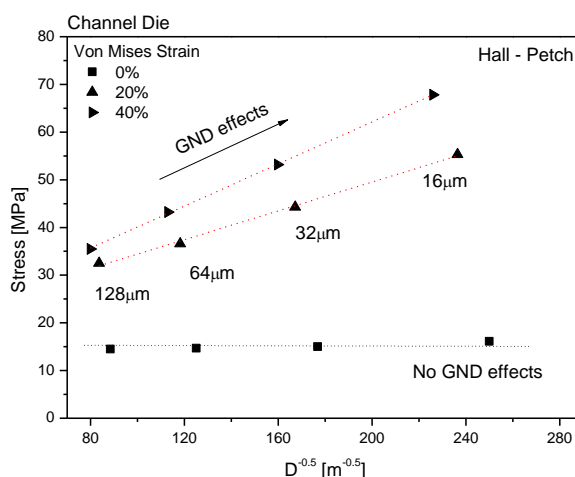


Figura 2: Tensión equivalente calculada para los RVE analizados correspondiente a diferentes estados de deformación $\epsilon_{VM} = 0$, $\epsilon_{VM} = 0.20$ y $\epsilon_{VM} = 0.40$ ($L_c = 4\mu\text{m}$).

Es interesante notar que no hay razón explícita en la ley de evolución de las tensiones críticas (incluyendo la ley de evolución de las dislocaciones SSD) para suponer una respuesta lineal. No obstante, el comportamiento lineal esperado en la evolución de la tensión es reproducido cualitativamente por el modelo propuesto. Como se observa de la Figura 2 la tensión aumenta a medida que el tamaño de grano disminuye. En los cálculos se asume que el material de partida está libre de estructuras de dislocaciones ($\rho_{GND} = 0$) y sólo presenta una densidad de dislocaciones homogéneamente distribuidas, ρ_0 , justificando la igualdad de tensiones calculadas para la respuesta inicial sin importar el tamaño de grano asumido (■ Figura 2).

En forma complementaria se realizaron simulaciones manteniendo fija la configuración y discretización de cada grano en el policristal, pero variando el tamaño de la celda utilizada, es decir modificando las dimensiones del RVE. Se construyó un RVE conteniendo 20 granos con una morfología tipo Voronoi; las dimensiones de celda se fijaron en $0.1\mu\text{m}$, $0.5\mu\text{m}$, $1\mu\text{m}$, $5\mu\text{m}$ y $10\mu\text{m}$, respectivamente. La Figura 3 muestra el aumento en la tensión predicha, verificando nuevamente una relación tipo Hall-Petch.

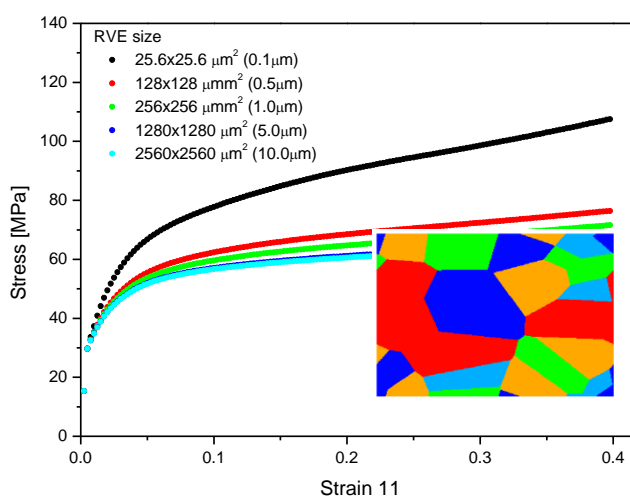


Figura 3: Curvas de carga predichas para RVE presentando una misma configuración topológica pero distinto tamaño del celda. RVE: 20 granos con orientación aleatoria, discretizado en $256 \times 256 \times 2$ celdas ($Y_c = 1.55 \times 10^{-8}$ m, $L_c = 4\mu\text{m}$).

Como se mencionó en la sección previa, el efecto de tamaño de grano es introducido por el término GND en el modelo de endurecimiento (Ec. (14)). La Figura 4 muestra los valores de densidad de dislocaciones SSD y GND predichos para dos de los RVE estudiados, 256 μm x 256 μm y 2560 μm x 2560 μm , respectivamente.

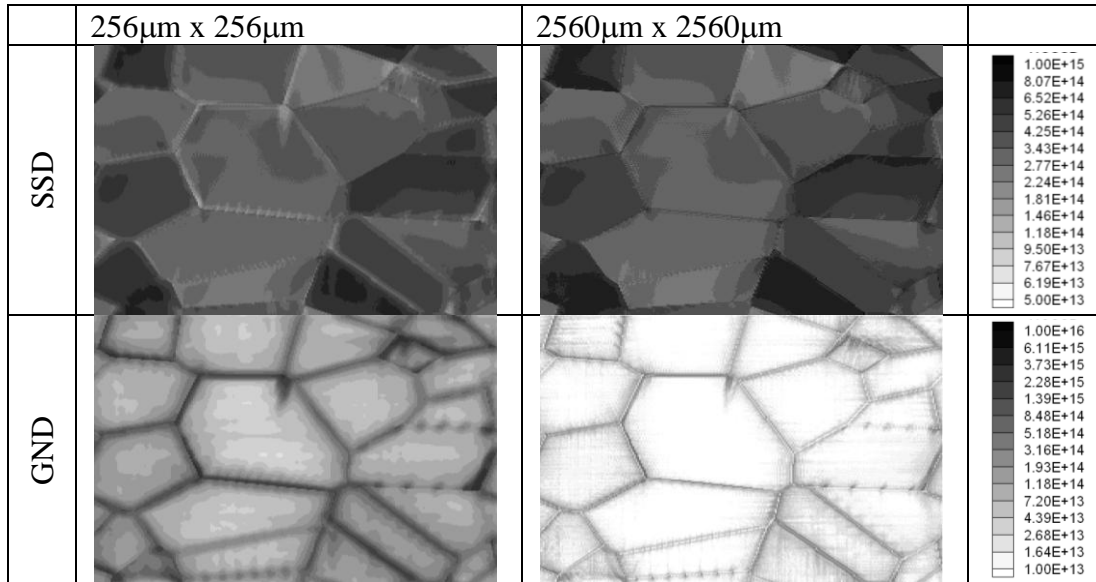


Figura 4: Densidad de dislocaciones SSD y GND según el tamaño de RVE: (izquierda) 256 μm x 256 μm y (derecha) 2560 μm x 2560 μm . En m^{-2} .

En ambos RVE las densidades máximas de GND alcanzadas son claramente superiores al valor máximo aportado por las dislocaciones SSD, $\rho_{\text{GND}} 3.4 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $\rho_{\text{SSD}} 2.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ y $\rho_{\text{GND}} 8.0 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$, $\rho_{\text{SSD}} 5.0 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ respectivamente, mostrando una alta localización en las proximidades de bordes de grano y granos pequeños.

4.2 Interacción entre granos vecinos

Una de las limitaciones de los modelos de homogenización es la dificultad de incluir la influencia de granos vecinos y la heterogeneidad intragranular en la respuesta local. Esta limitación es salvada al utilizar modelos de elementos finitos, o de campo completo ya que admiten una descripción topológica del RVE, con lo cual naturalmente incluyen los efectos de

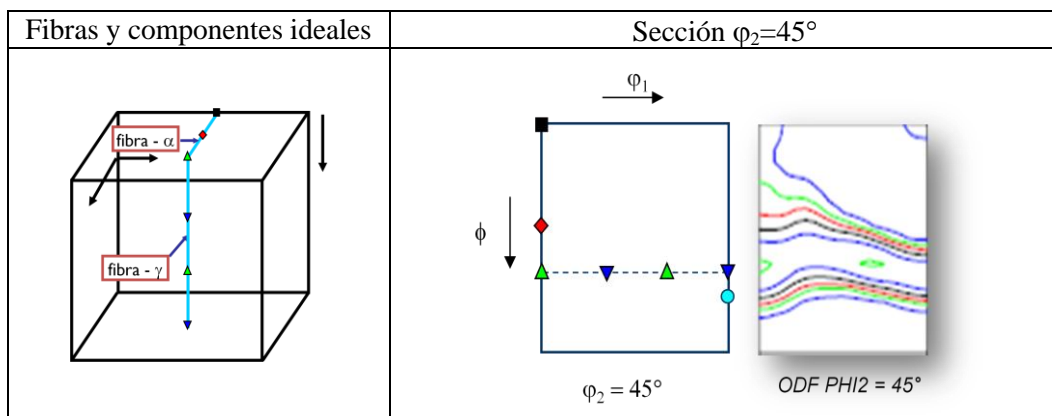


Figura 5: Ubicación en el espacio de Euler de las componentes típicas de textura observadas en procesos de laminado en frío de materiales BCC. Derecha corte $\varphi_2=45^\circ$ ideal y correspondiente a un acero típico de embutido

vecindad y heterogeneidad intragranular en la respuesta local del material. Los materiales BCC laminados generalmente presentan una distribución de orientaciones característica, donde se destaca la construcción de la llamada fibra γ , compuesta por orientaciones con la dirección $\langle 111 \rangle$ paralela a la normal a la chapa, incluyendo las orientaciones $\{111\}\langle 112 \rangle$ (γ_1) y $\{111\}\langle 011 \rangle$ (γ_2). La Figura 5 muestra esquemáticamente la posición en el espacio de Euler de las componentes de texturas típicas observadas en procesos de laminado en frío de materiales BCC.

Con el objetivo de estudiar el efecto de vecindad sobre la respuesta local del material se diseñaron 6 RVEs correspondientes a multicristales de 20 granos con igual estructura topológica, diferenciándose en la orientación asignada a determinados granos, como se muestra en la Figura 6. Las orientaciones cristalográficas de los RVE estudiados sigue la configuración mostrada en la Figura 6 (derecha), donde para cada RVE# se asignó un diferente conjunto de orientaciones. Mientras que γ_1 -RVE significa que los granos identificadas con #3 y #9 presentan una orientación ideal γ_1 ($\varphi_1=0^\circ$, $\varphi=54.74^\circ$, $\varphi_2=45^\circ$); γ_2 -RVE significa que la orientación asignada a dichos granos es γ_2 ($\varphi_1=30^\circ$, $\varphi=54.74^\circ$, $\varphi_2=45^\circ$). A los granos identificados con #10 y #20 se les asigna igual orientación, su interés está en que presentan el mismo tamaño pero diferente forma.

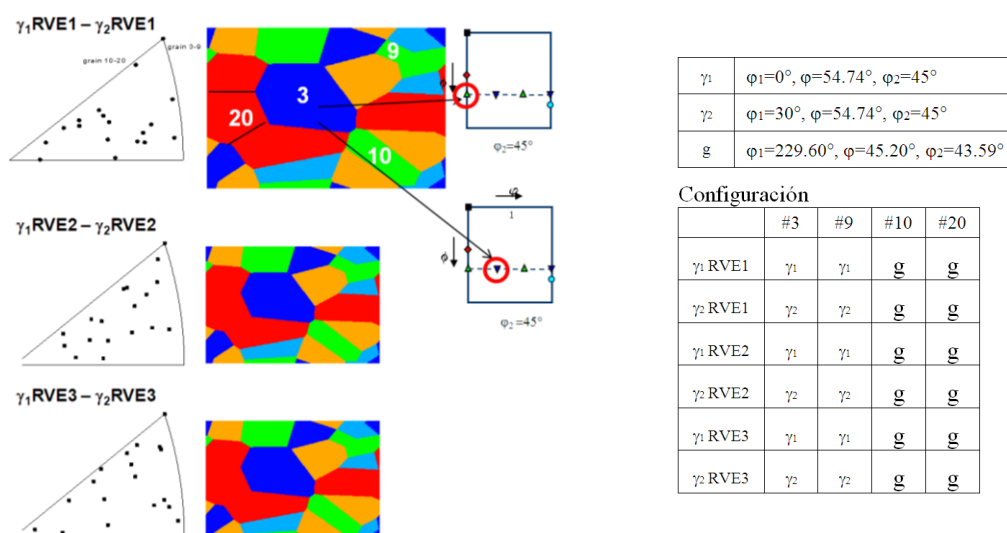


Figura 6: Configuraciones de RVE utilizadas: (izquierda) figura de polos inversa ubicando las 20 orientaciones aleatorias que definen la textura del multicristal; (centro) estructura topológica del RVE, indicando la numeración de los granos utilizados en el análisis; (derecha) detalle de las configuraciones, los granos #3 y #9 comparten la misma orientación y diferenciándose en tamaño, los granos #10 y #20 comparten orientación y tamaño diferenciándose en forma.

La Figura 7 presenta las curvas de carga para los granos estudiados, calculadas como un promedio simple de los estados de tensión-deformación de las celdas que definen el grano, a una deformación macroscópica $\epsilon_{VM} = 0.40$. Una primera característica que se puede observar a partir de los conjuntos de curvas mostradas es la influencia en su comportamiento debido a la presencia de una vecindad diferente. No obstante, salvo para la configuración γ_2 -RVE2, la curva del grano #9 presenta un mayor nivel de tensión respecto del grano #3, (ambos con igual orientación inicial) debido fundamentalmente a su diferencia de tamaño. Los granos #10 y #20, si bien su comportamiento no es igual, presentan variaciones más acotadas, indicando que la diferencia en forma es de menor importancia frente al efecto introducido por el tamaño. Sin embargo, nuevamente este comentario general parecería fallar en el caso de la

configuración γ_2 -RVE2 donde a partir de una deformación de 0.20 el comportamiento del grano #10 difiere cualitativamente del comportamiento del grano #20. Puede verse en la Figura 8 que este efecto se correlaciona con una distribución de GND marcadamente diferente entre los granos #10 y #20 en dicha configuración.

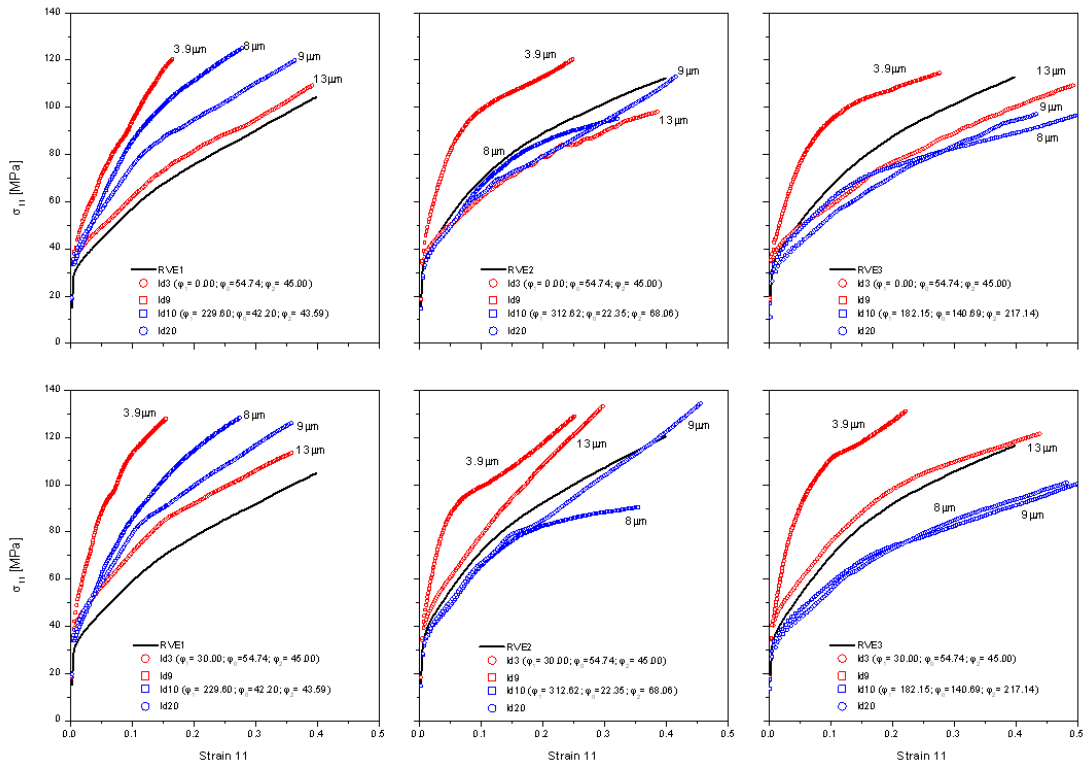


Figura 7: Curvas de carga tensión-deformación predichas para los granos #3 (13μm), #9 (3.9μm), #10 (8μm) y #20 (9μm) en función de los diferentes RVE analizados. La curva negra corresponde a la curva de carga del RVE en su conjunto.

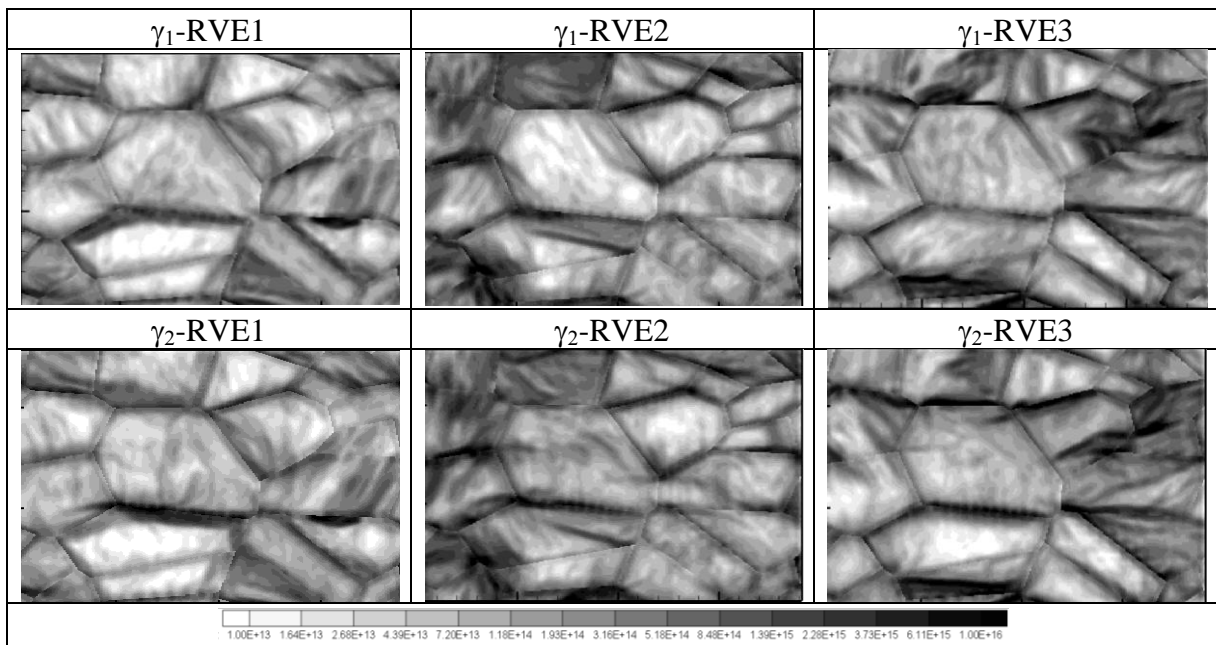


Figura 8: Contorno de igual densidad de dislocaciones GND para cada una de las configuraciones estudiadas. Deformación plana a $\epsilon_{VM} = 0.40$. En m^{-2} .

5 DENSIDAD DE DISLOCACIONES EN UN ACERO AKDQ

En esta sección vemos la factibilidad de caracterizar la microestructura de una chapa de acero AKDQ de 0.67mm de espesor sometida a ensayos de tracción uniaxial, deformación plana y expansión biaxial (ensayos requeridos para determinar la curva de formabilidad del material, Signorelli et al., 2012) en base al análisis de la distribución de las desorientaciones dentro del grano. La Figura 9 muestra los mapas de EBSD informados como figuras de polo inversa junto con la densidad de dislocaciones CID obtenidos, en muestras deformadas bajo sollicitaciones próximas a tracción, deformación plana y expansión biaxial.

Para cuantificar la distribución de desorientaciones tomamos como punto de partida un conjunto de m orientaciones discretas caracterizadas por los cuaterniones q_i , su orientación media puede expresarse en la forma siguiente:

$$\bar{q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^m q_i, \quad N = \left| \sum_{i=1}^m q_i \right|, \quad (23)$$

detalles pueden encontrarse en Pantleon, 2005. Para cada una de las orientaciones q_i se calcula su desorientación respecto a la orientación media:

$$\delta q_i = q_i \bar{q}^{-1} \quad (24)$$

La evaluación del conjunto de desorientaciones se lleva a cabo bajo la restricción de seleccionar siempre la representación simétrica más próxima (en término de desorientación), al valor de \bar{q} , para cada q_i . Una vez definido el cuaternión desorientación podemos, a partir del vector desorientación \vec{q}_i , definir el tensor simétrico de segundo orden de momentos centrales \mathbf{Q} . Puede probarse fácilmente que el tensor \mathbf{Q} es independiente del valor del cuaternión promedio \bar{q} .

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \delta \vec{q}_i \otimes \delta \vec{q}_i \quad (25)$$

La ventaja de evaluar el tensor \mathbf{Q} radica en que provee una caracterización compacta de la distribución de desorientaciones dentro del grano o dominio que representa el conjunto de orientaciones m . Del análisis de autovalores y autovectores de \mathbf{Q} podemos inferir no sólo el ancho de la distribución sino su anisotropía en el espacio de orientaciones. Siguiendo el análisis de He (He et al., 2008), la matriz \mathbf{Q} , de dimensión 3x3, tiene 3 autovalores no negativos λ_α . A partir de cada valor λ_α se determina la desviación estándar σ_i de la distribución de desorientaciones en la dirección del autovector \vec{q}_α correspondiente al autovalor λ_α . Los 3 autovectores determinan un sistema de referencia definido por \bar{q} . El autovector $\hat{\vec{q}}_\alpha$ correspondiente al autovalor de módulo máximo caracteriza el eje de rotación dominante $\vec{r}^* = \hat{\vec{q}}_\alpha$. A los fines comparativos es mejor expresar el vector \vec{r}^* en el sistema de referencia externo:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vec{r}^* \end{pmatrix} = \bar{q}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{r}^* \end{pmatrix} \bar{q} \quad (26)$$

El valor medio geométrico de estos desvíos, $\bar{\sigma} = \sqrt[3]{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}$, describe la dispersión isotrópica (ancho de la distribución). El cociente entre el mayor de los desvíos estándar y el valor medio geométrico caracteriza la anisotropía de la distribución de orientaciones llamada dispersión anisotrópica.

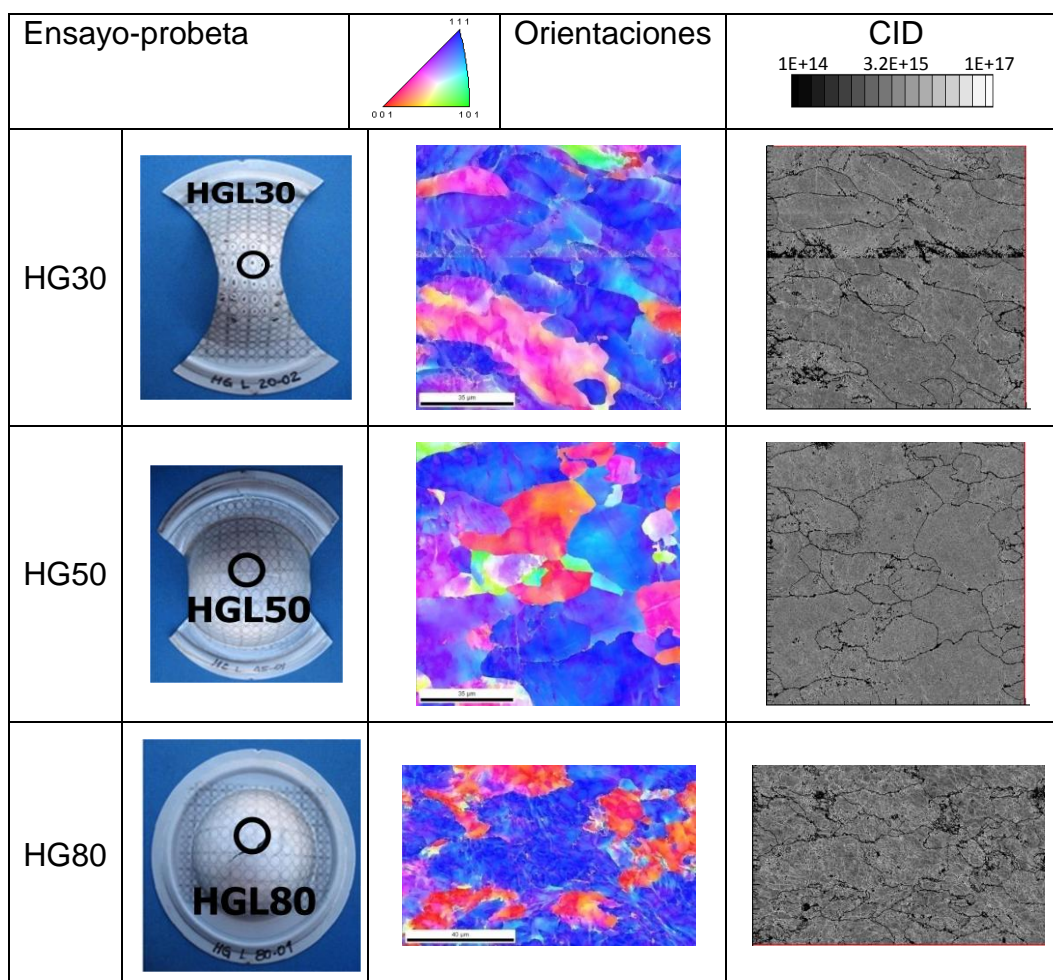


Figura 9: Análisis del material deformado según tracción uniaxial (HG30), deformación plana (HG50) y biaxial balanceada (HG80). La zona analizada se corresponde con lo indicado en el círculo negro en la probeta (Izquierda). (Centro) Figura de polo inversa; (Derecha) Densidad de dislocaciones inducida por curvatura [m^{-2}]. En todos los casos el paso de barrido de EBSD es de $0.1 \mu m$.

En la [Figura 10](#) se grafica la dispersión isotrópica y anisotrópica para las cuatro muestras analizadas en función del tamaño de grano del material. El material de partida muestra, como era de esperar, la menor dispersión isotrópica mientras que los mayores valores se presentan en el caso de deformación biaxial balanceada. Esto se corresponde con la visualización de un entramado más marcado de las líneas con altos valores de GND para la probeta HG80 ([Figura 9](#)). En el caso de la dispersión anisotrópica los resultados obtenidos son similares en todos los casos analizados mostrando un crecimiento cuando el tamaño de grano disminuye. Es también interesante analizar estos parámetros en función de direcciones típicas normales a la chapa, tal como se muestra en la [Figura 10](#) (derecha). Puede observarse que tanto la muestra de partida como la próxima a deformación plana presentan las menores dispersiones isotrópicas, manifestándose este efecto principalmente sobre la fibra γ , donde las probetas sometidas a deformación uniaxial y biaxial balanceada muestran una marcada diferencia.

La [Figura 11](#) es la proyección, en forma de figura de polos, de la ubicación de los ejes preferenciales de rotación en las muestras analizadas, respecto a un sistema de referencia solidario a la chapa. La distribución de los ejes preferenciales de rotación indica una clara evolución a partir de su distribución inicial (aleatoria). Asimismo se observa una marcada

aleatoriedad en el caso de deformación biaxial balanceada, consistente con la simetría del ensayo.

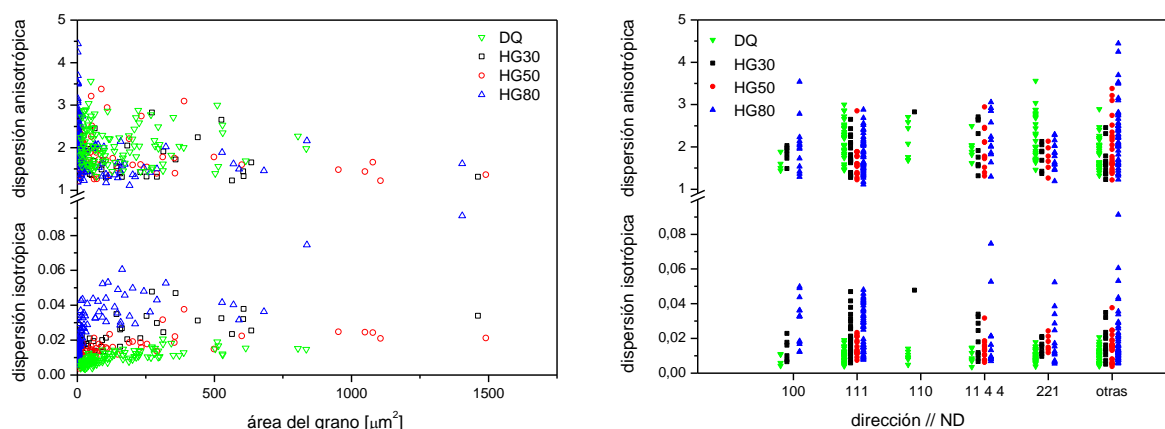


Figura 10: Dispersión isotrópica y anisotrópica en el material inicial y distintos estados de deformación en función de: (izquierda) área de grano, (derecha) dirección cristalina paralela a la normal a la chapa.

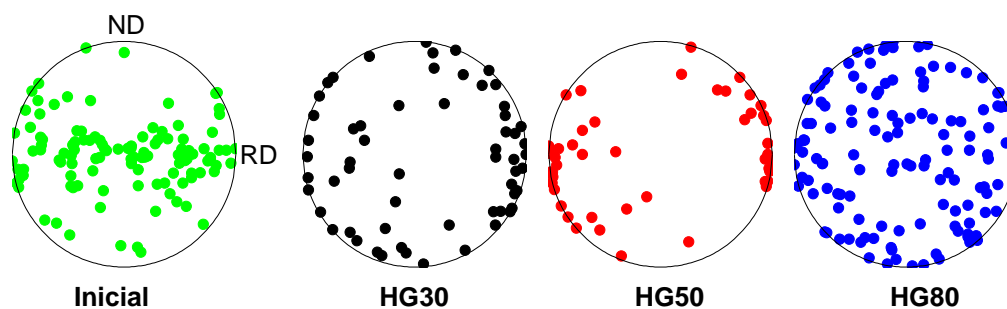


Figura 11: Eje de rotación preferencial en función de la sollicitación aplicada. El eje preferencial de cada grano es referido a un sistema de referencia solidario a la chapa.

6 CONCLUSIONES

La implementación de una ley de endurecimiento que incluye densidad de dislocaciones GND en un código de campo completo de plasticidad cristalina, permite capturar promisoriamente efectos de tamaño de grano como así también interacción entre granos vecinos. Debe notarse que el modelo resulta sensible al tamaño de la discretización, lográndose disminuir este efecto a través de una regularización del campo de GND. Asimismo, el tamaño de grano o dominio, cuando éste se encuentra muy deformado, es el principal factor en el incremento de GND, lo cual sugiere considerar con mayor profundidad la forma en que se evalúan magnitudes dependientes de gradientes.

Respecto a la caracterización de la distribución de orientaciones, se logró con la introducción del tensor de momentos centrales \mathbf{Q} cuantificar la isotropía y anisotropía de la distribución de desorientaciones como también los ejes preferenciales de rotación. Estas magnitudes muestran características diferentes según la sollicitación a que fue sometido el material. La evaluación del tensor \mathbf{Q} a partir de simulaciones de campo completo permitirá una confrontación adicional de las respuestas que se predicen con los datos experimentales

REFERENCES

- Aifantis, E.C., The physics of plastic deformations, *International Journal of Plasticity*, 3:211-247, 1987.
- Asaro, R.J., Crystal plasticity, *Journal of Applied Mechanics*, 50:921-934, 1983.
- Ashby, M.F., The deformation of plastically non-homogeneous materials, *Philosophical Magazine*, 21:399-424, 1970.
- Busso, E.P., *Cyclic deformation of monocrystalline nickel aluminide and high temperature coatings*, Ph. D. thesis, Department of Mechanical Engineering, MIT, 1990.
- Dai, H., *Geometrically-necessary dislocation density in continuum plasticity theory, FEM implementation and applications*, Ph. D. thesis, MIT, 1997.
- Eisenlohr, P., Diehl, M., Lebensohn, R.A., Roters, F., A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains, *International Journal of Plasticity*, 46:37-53, 2013.
- Essmann, U., Mughrabi, H., Annihilation of dislocation during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities, *Philosophical Magazine*, 40:731-756, 1979.
- Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F., Hutchinson, J.W., Strain gradient plasticity: theory and experiment, *Acta Metallurgica et Materialia*, 42:475-487, 1994.
- Gao, H., Huang, Y., Nix, W.D., Hutchinson, J.W., Mechanism-based strain gradient plasticity - I. Theory, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47:1239-1263, 1999.
- Gurtin, M.E., A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50:5-32, 2002.
- Harder, J., A crystallographic model for the study of local deformation processes in polycrystals, *International Journal of Plasticity*, 15:605-624, 1999.
- He, W., Ma, W., Pantleon, W., Microstructure of individual grains in cold-rolled aluminium from orientation inhomogeneities resolved by electron backscattering diffraction, *Materials Science & Engineering*, A 494:21-27, 2008.
- Hughes, D.A., Hansen, N., Bammann, D.J., Geometrically necessary boundaries, incidental dislocation boundaries and geometrically necessary dislocations, *Scripta Materialia*, 48:147-153, 2003.
- Kalidindi, S.R., Bronkhorst, C.A., Anand, L., Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40:537-569, 1992.
- Kröner, E., Die Spannungsfunktionen der dreidimensionalen anisotropen Elastizitätstheorie, *Zeitschrift für Physik*, 140:386-398, 1955.
- Lebensohn, R.A. and Tomé, C.N., A self consistent approach for the simulations of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to Zirconium alloys, *Acta Metallurgica et Materialia*, 41:2611-2624, 1993.
- Lebensohn, R.A., Brenner, R., Castelnau, O., Rollet, A.D., Orientation image-based micromechanical modeling of subgrain texture evolution in polycrystalline copper, *Acta Materialia*, 56:3914-26, 2008.
- Lebensohn, R.A., Castelnau, O., Brenner, R., Gilormini, P., Study of antiplane deformation of linear 2-D polycrystals with different microstructures, *International Journal of Solids and Structures*, 42:5441-5459, 2005.
- Lebensohn, R.A., Kanjarla, K., Eisenborh, P., An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials, *International Journal of Plasticity*, 32-33, pp. 59-69, 2012.

- Lebensohn, R.A., Liu, Y., Ponte Castañeda, P., Macroscopic properties and field fluctuations in model power-law polycrystals: full-field solutions versus self-consistent estimates, *Proceedings of the Royal Society of London A*, 460:1381-1405, 2004.
- Lebensohn, R.A., Liu, Y., Ponte Castañeda, P., On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations, *Acta Materialia*, 52:5347-5361, 2004.
- Lebensohn, R.A., N-site modelling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast Fourier transform, *Acta Materialia*, 49:2723-2737, 2001.
- Liu, Q., Jull Jensen, D., Hansen, N., Effect of grain orientation on deformation structure in cold-rolled polycrystalline aluminium, *Acta Materialia*, 46:5819-5838, 1998.
- Ma, A., Roters, F., Raabe, D., A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations, *Acta Materialia*, 54:2169-79, 2006.
- Michel, J., Moulinec, H., Suquet, P., A computational method based on augmented Lagrangians and fast Fourier transforms for composites with high contrast, *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 1:79-88, 2000.
- Moulinec, H., Suquet, P., A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris II*, 318:1417-1423, 1994.
- Moulinec, H., Suquet, P., Numerical methods for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157:69-94, 1998.
- Nye, J.F., Some geometrical relations in dislocated crystals, *Acta Metallurgica*, 1:153-162, 1953.
- Pantleon, W., Retrieving orientation correlation in deformation structures from orientation maps, *Material Science and Technology*, 21:1392-1396, 2005.
- Signorelli, J.W., Serenelli, M.J., Bertinetti, M.A., Experimental and numerical study of the role of crystallographic texture on the formability of an electro-galvanized steel sheet, *Journal of Materials Processing Technology*, 212:1367-1376, 2012.