

شبیه سازی مونت کارلو میکروساختار نواحی اطراف جوش آلیاژهای آلومینیوم توسط پرتوهای الکترونی پرنرژی

محمد فرنوش

مربی گروه مهندسی متالورژی و مواد - دانشکده فنی - دانشگاه تهران

(تاریخ دریافت ۸۲/۷/۱۲، تاریخ دریافت روایت اصلاح شده ۸۳/۹/۲۸، تاریخ تصویب ۸۳/۱۱/۲۴)

چکیده

در تحقیق حاضر روشی برای شبیه سازی مونت کارلو میکروساختار نواحی اطراف جوش آلیاژهای آلومینیوم ۵۰۱۰ و ۶۰۶۳ توسط پرتوهای الکترونی پرنرژی مورد مطالعه قرار گرفته است. نمونه های جوشکاری شده از هر آلیاژ توسط شتاب دهنده خطی رودوترون در مدت زمان ۵ ثانیه و شدت جریان ۶ mA با انرژی ثابت ۱۰ MeV بصورت استاتیک تحت پرتودهی با شدت های متفاوت گردید. مقایسه نتایج بدست آمده از شبیه سازی و نتایج تجربی، نشان دهنده مناسب بودن روش شبیه سازی می باشد.

واژه های کلیدی: شبیه سازی، مونت کارلو، میکرو ساختار، آلومینیوم، پرتوهای الکترونی

مقدمه

بین پایه های فکری و پارامترهای فیزیکی استفاده از این روش وجود دارد. اساس آن متکی بر روابط ترمودینامیکی بین واکنش های اتمی است و نیاز به هیچ یک از قوانین نظری و تجربی و حتی تقریب های ریاضی ندارد [۲،۳].

در این روش، ابتدا سطح یا حجم ماده مورد نظر را به صورت یک ماتریس دو بعدی یا سه بعدی در نظر می گیریم بطوریکه هر مولفه ماتریس با یک عنصر در سطح یا حجم ماده معرفی گردد. ارزش هر نقطه در ماتریس نمایانگر جهت گیری کریستالوگرافی آن در نمونه می باشد. دانه های نقاط هم ارزش در ماتریس هم عدد نشان دهنده یک دانه در نمونه است. مرز دانه ها نیز صفحات موهومی هستند که دانه های غیر هم جهت از لحاظ عددی یکسان نیستند را از یکدیگر جدا می کند.

بعد از انتخاب نوع ماتریس دو بعدی یا سه بعدی و پر کردن ماتریس با مقادیر تصادفی اولیه شبیه سازی آغاز می شود، چهار مرحله اصلی برای شبیه سازی عبارتند از:

۱- محاسبه انرژی آزاد هر عنصر ماتریس G_i با جهت گیری کریستالوگرافی آن Q_i برپایه عنصر همسایه آن عنصر

۲- انتخاب تصادفی یک جهت گیری جدید برای همان عنصر ماتریس Q_f .

۳- محاسبه جدید انرژی آزاد برای همان عنصر G_f اما با

میکروساختارها از فاکتور مهمی در بررسی خواص مواد مخصوصاً هنگامی که نیاز به برقراری تعادل بین خواص متفاوت است، برخوردار هستند. در حقیقت یکی از مسائل مهم در رشته متالورژی، کنترل رشد دانه و ریز ساختار می باشد. به همین دلیل این پدیده به طور جامع و کامل در رشته متالورژی مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است.

در یک روش کلاسیک، برک و ترن بال یک رابطه پارابولیک برای رشد دانه پیشنهاد کردند. آنها رشد دانه را نتیجه حرکت مرز دانه معرفی کردند و کشش سطحی مرزدانه ها را نیروی محرکه برای رشد دانه بعد از تبلور مجدد دانستند. این رابطه پارابولیک به طور آزمایشی در نیکل، مس و α -Brass مورد تایید قرار گرفت [۱].

معمولاً در این نوع مطالعات از نرم افزارهای تحلیل کننده تصاویر میکروسکوپی برای تحلیل دقیق میکروساختارها و مقایسه آنها با یکدیگر کمک گرفته می شود. اخیراً، با تولید ریز پردازنده های بسیار قوی در صنعت الکترونیک و کامپیوتر، روش ها و نرم افزارهای جدیدتری برای شبیه سازی کامپیوتری در این زمینه ارائه شده است.

در این رابطه اسرولویتز و آندرسون، استفاده از روش مونت کارلو را برای شبیه سازی رشد دانه و میکروساختارها پیشنهاد کردند که شباهت و رابطه نزدیکی

روش شبیه سازی

برای شبیه سازی میکروساختار نمونه ها با استفاده از روش مونت کارلو از یک شبکه دوبعدی مربعی که هر نقطه از شبکه دارای ۸ همسایه نزدیک به خود است استفاده میشود. برای هر نقطه شبکه یک ارزش (عدد) که متناظر با جهت گیری خاص همان اتم متناظر در نمونه است، به صورت تصادفی در نظر گرفته می شود. در نتیجه یک دانه در ماتریس از کنار هم قرار گرفتن تعدادی از نقاط هم ارزش شبکه مشخص می شود و مرز دانه ها نیز صفحات موهومی هستند که این نقاط غیر هم ارزش - اتم های غیر هم جهت - را از یکدیگر جدا میسازند.

شبیه سازی با انتخاب یک ارزش - عدد - تصادفی برای هر نقطه از ماتریس شروع می شود. از ۱ تا Q، تعداد ارزش های ممکن برای هر نقطه انتخابی از ماتریس می باشد. حداقل مقدار Q، ۳۰ در نظر گرفته می شود. برای $Q < 30$ توزیع مناسب اندازه دانه با روش مونت کارلو محدود خواهد شد [۴].

به دنبال پیشنهاد اندرسون، انرژی مرز دانه، نیروی محرکه برای حرکت مرز دانه است و به صورت زیر تعریف می شود.

$$E_{ij} = -J \sum_{n=1}^m (\delta_{S_{ij} S_{ij}^n} - 1) \quad (1)$$

که $\delta_{S_{ij} S_{ij}^n}$ معروف به دلتا-کرونکر است که اگر نقطه همسایه با نقطه S_{ij} هم ارزش باشند، مقدار آن صفر خواهد بود. m تعداد همسایه های نزدیک به یک نقطه در شبکه است که $m = 8$ برای ماتریس مربعی و $m = 6$ برای ماتریس مثلثی خواهد بود. J توزیع انرژی سیستم بین دو نقطه همسایه غیر هم ارزش - غیر هم عدد- در شبکه می باشد که مقدار آن مثبت و ثابت است. در نتیجه اگر دو نقطه همسایه ماتریس هم ارزش باشند مقدار $E_{ij} = 0$ و اگر دو نقطه همسایه ماتریس غیر هم ارزش باشد مقدار E_{ij} مساوی J و مثبت خواهد شد.

با محاسبه E_{ij} هر نقطه (i, j) شبکه نسبت به هر نقطه همسایه آن در شبکه و مجموع E_{ij} ها، مقدار کلی E_{ij} برای نقطه (i, j) شبکه بدست می آید.

با توجه به مطالب فوق تغییرات انرژی برای هر نقطه (i, j)

جهت گیری جدیدش Q_f .

۴- مقایسه دو مقدار با هم $G_f - G_i$ در صورتی که مقدار آن منفی شود، جهت گیری عنصر جدید قابل قبول است. این چهار مرحله را میلیونها بار در موقعیت های تصادفی ماتریس تکرار می کنیم. نتیجه کلی بدست آمده از آن، شبیه سازی میکروساختار بر اساس کاهش انرژی آزاد در سیستم است که در اصل نیروی محرکه برای رشد دانه محسوب می شود.

روش تحقیق

در این تحقیق از دو ماده اولیه استفاده شده است: ۱- آلیاژ آلومینیوم حرارتی ناپذیر ۵۰۱۰ نورد شده (۰/۲۸ Mn - ۰/۴۷ Fe - ۰/۲۴ Si - ۰/۰۲ Cu - ۰/۰۲ Ti - ۰/۲۸ Mg - Al درصد وزنی) به ضخامت ۲/۵ mm. ۲- آلیاژ عملیات پذیر ۶۰۶۳ اکسترود شده (۰/۱۳Ti - ۰/۳۹ Si - ۰/۲۱ Fe - ۰/۵۹ Mg - Al درصد وزنی) به ضخامت ۰/۳ mm.

جهت تهیه نمونه های جوشکاری ابتدا تسمه هایی از آلیاژ ۵۰۱۰ در جهت نورد و آلیاژ ۶۰۶۳ در جهت اکسترودژن بریده شد. سپس دو تسمه از هر آلیاژ به ابعاد 10×5 cm کنار هم قرار داده شده و به صورت لب به لب عمود در جهت نورد و اکسترودژن توسط روش جوش قوس الکتریکی با الکتروود تنگستن با حفاظ گاز خنثی (TIG) با فلزپرکننده $Al_{12}Si$ ۴۰۴۷ با جریان DC از دو طرف جوشکاری شدند. برای انجام آزمایش ها، نواحی اطراف جوش (HAZ) نمونه های جوشکاری شده هر یک از آلیاژها از نمونه ها جدا شدند. پس از آن، این نواحی تحت آزمایش پرتو دهی قرار گرفتند. پرتو دهی نمونه ها توسط یک شتاب دهنده الکترون (رودوترون) غیر خطی انجام شد. نمونه ها در مدت زمان ۵ ثانیه و در شدت جریان ثابت ۶mA با انرژی ثابت ۱۰Mev به صورت استاتیک پرتو دهی شدند. تغییرات دز پرتو الکترونی در زیر محل خروج پرتو به صورت گوسی بود. یعنی در وسط محل خروج پرتو الکترونی دز ماکزیمم بود و در اطراف آن، دز کاهش می یافت. سپس نمونه های جوشکاری شده پرتو دهی شده با دز متفاوت مورد بررسی ریزساختاری توسط میکروسکوپ الکترونی و تحلیل گر تصویری قرار گرفتند.

تغییر را داشته باشد در صورتی که $E_{ij} < \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ باشد باید به مرحله ۱ بازگشت و در صورتی $E_{ij} > \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ باشد، عدد S_{ij} به صورت تصادفی تغییر داده می شود.

۴- مقدار E_{ij} جدید را محاسبه می کنیم.

۵- E_{ij} جدید را با E_{ij} قدیم مقایسه می کنیم اگر $E_{ij,new} \leq E_{ij,old}$ باشد. عدد جدید نقطه (i, j) پذیرفته می شود. در غیر این صورت به مرحله ۱ بازمیگردیم.

مراحل ۱ تا ۵ را یک میلیون بار تکرار می کنیم، نتیجه بدست آمده از آن معرف شبهه سازی میکروساختار بر اساس کاهش انرژی آزاد سیستم است.

با توجه به روابط بالا مشاهده می شود T ، دمای نمونه در روش شبهه سازی نقش بسزایی دارد چون حداقل احتمال تغییر با رابطه $K = \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ تعریف شده است که انرژی اکتیواسیون رشد دانه است، R ثابت جهانی گازها و T دمای مطلق نمونه می باشد.

در این تحقیق فرض شد که میزان انرژی دریافتی در واحد جرم هر نمونه (KGY) که در هنگام پرتودهی الکترونی به آنها داده می شود در بالا بردن دمای نمونه موثر بوده است. حال با توجه به رابطه زیر می توان دمای هر نمونه را با داشتن میزان انرژی دریافتی در واحد جرم نمونه بدست آورد:

$$KGY\left(\frac{J}{kg}\right) = \frac{Q}{m} = \int_{T_0}^T C_p dT \quad (4)$$

که T_0 دمای محیط و $C_p = a + bT + cT^{-2}$ می باشد. محاسبات نشان داد که فرض بالا مبنی بر اینکه تمام انرژی دریافتی توسط نمونه ها به انرژی گرمایی تبدیل می شود با تقریب خوبی قابل قبول است و دمای بدست آمده از رابطه بالا با دمای اندازه گیری شده در آزمایش تقریباً یکسان بود.

نتایج

میزان انرژی پرتودهی نمونه ۵۰۱۰ و ۶۰۶۳ به ترتیب عبارت از ۴۳/۵۸ KGY و ۶۹/۹۹ KGY می باشد.

از شبکه به صورت زیر محاسبه می شود:

$$\Delta E_{ij} = E_{ij,new} - E_{ij,old} \quad (2)$$

که $E_{ij,new}$ انرژی نقطه (i, j) ماتریس بعد از ارزش گذاری جدید برای همان نقطه (i, j) شبکه است و $E_{ij,old}$ انرژی نقطه (i, j) قبل از ارزش گذاری جدید است. با توجه به مطلب فوق می توان نتیجه گرفت که برای کاهش ΔE_{ij} باید ارزش نقطه (i, j) به گونه ای تغییر کند که ارزش آن برابر با ارزش بیشترین همسایه های هم ارزش شود. چون طبق معادله (۱) E_{ij} نقاط هم ارزش صفر خواهد بود و اگر ارزش نقطه (i, j) به گونه ای تغییر کند که تعداد نقاط هم ارزش همسایه افزایش یابد در مجموع E_{ij} جدید کمتر از E_{ij} قبل میشود. بدین ترتیب تغییر احتمال p به صورت زیر بیان می شود.

$$P = \begin{cases} 1 & \Delta E_{ij} \leq 0 \\ \exp\left(\frac{-\Delta E_{ij}}{RT}\right) & \Delta E_{ij} > 0 \end{cases} \quad (3)$$

در صورتی که ΔE_{ij} مثبت باشد یعنی انرژی سیستم بعد از ارزش گذاری مجدد افزایش یافته است و بر عکس اگر ΔE_{ij} منفی شود با کاهش انرژی سیستم بعد از ارزش گذاری مجدد همراه هستیم. که در این صورت شبهه سازی را مجبور به پذیرفتن این تغییر ارزش گذاری می کند. چون احتمال این تغییر صددرصد خواهد بود.

الگوریتم برنامه نویسی

در این تحقیق زبان برنامه نویسی دلفی می باشد. ابتدا یک ماتریس 100×100 در نظر گرفته می شد که متناظر با سطح نمونه به ابعاد 1×1 mm می باشد. سپس اعداد ۱ تا Q به صورت تصادفی در ماتریس توزیع می شود. بعد از آن الگوریتم شبهه سازی به صورت مراحل زیر انجام می شود:

۱- یک نقطه از ماتریس به صورت تصادفی انتخاب می شود. S_{ij}

۲- مقدار E_{ij} آن طبق معادله (۱) محاسبه می شود.

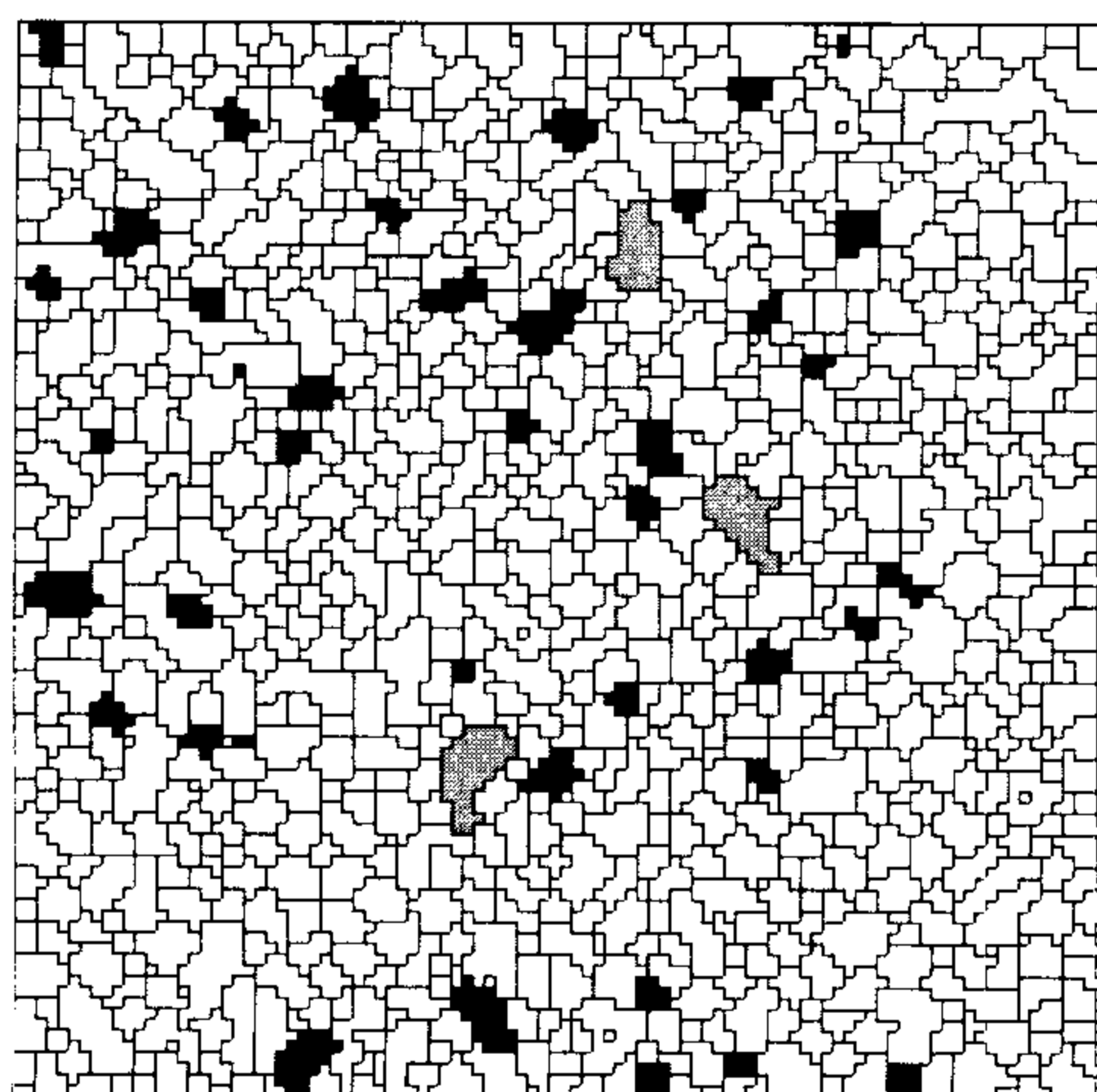
۳- مقدار E_{ij} با پارامتر $K = \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ مقایسه می شود. K نماینگر حداقل احتمال سد انرژی یک نقطه (i, j) است که هر نقطه (i, j) باید این حداقل شانس

نتایج بررسی ریز ساختار با تحلیل گر تصویری

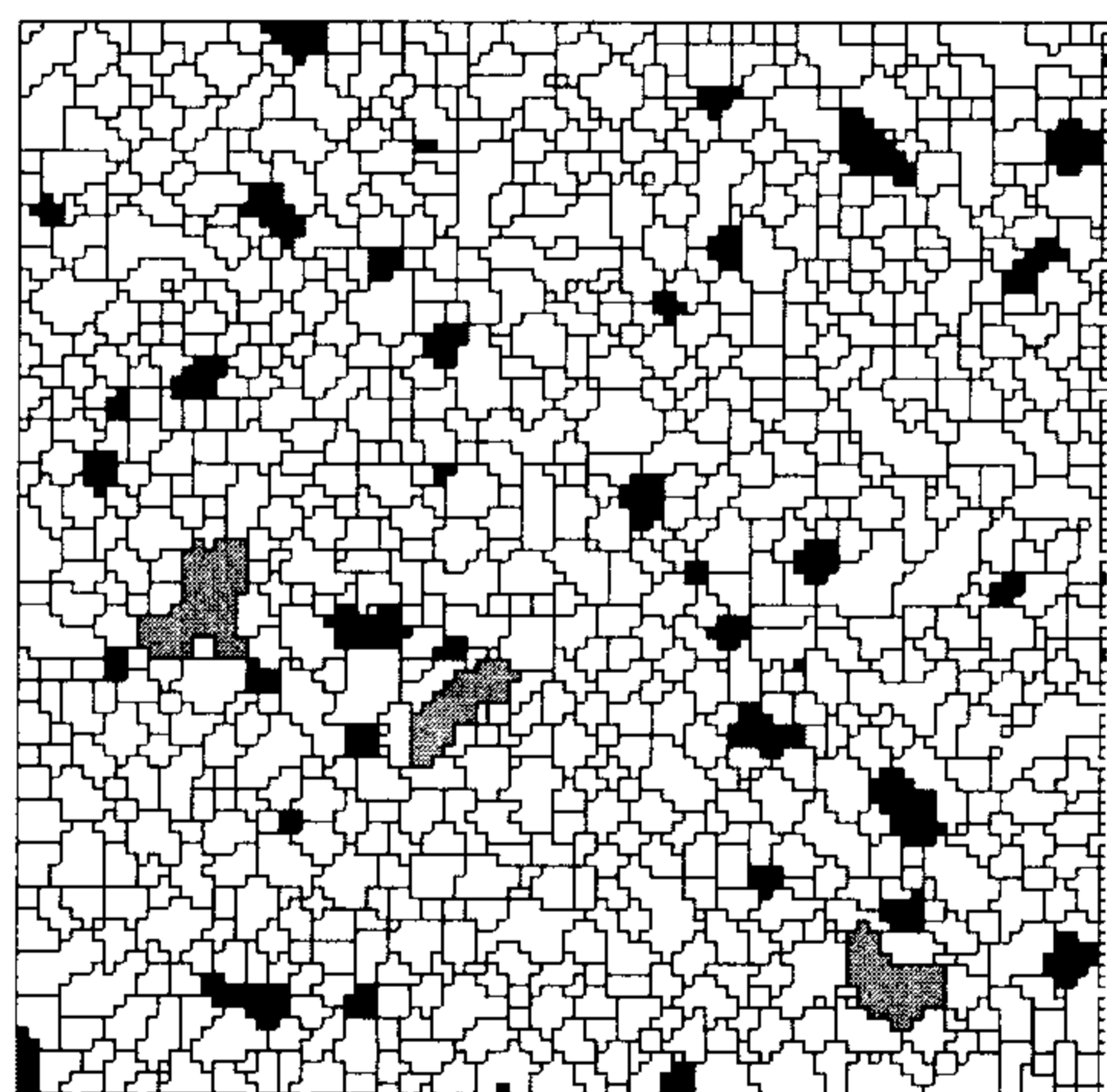
نتایج بررسی ریز ساختار با تحلیل گر تصویری در جدول (۱) نشان داده شده اند. در بررسی ریز ساختار با تحلیل گر تصویری مقدار متوسط، محیط، مساحت و تعداد در سطح رسوبات (رسوب ریز و رسوب درشت) مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج شبیه سازی کامپیوتری

نتایج حاصل از برنامه در شکل (۳) و (۴) آمده است. همانطور که در شکل نشان داده شده است، میکروساختار نمونه ۵۰۱۰ شبیه سازی شده از رسوبهای درشت $(Fe,Mn)Al_6$ و رسوب های ریز Al,Mn,Si,Fe در زمینه تشکیل شده است.



شکل ۳: نمونه ۵۰۱۰ شبیه سازی شده.

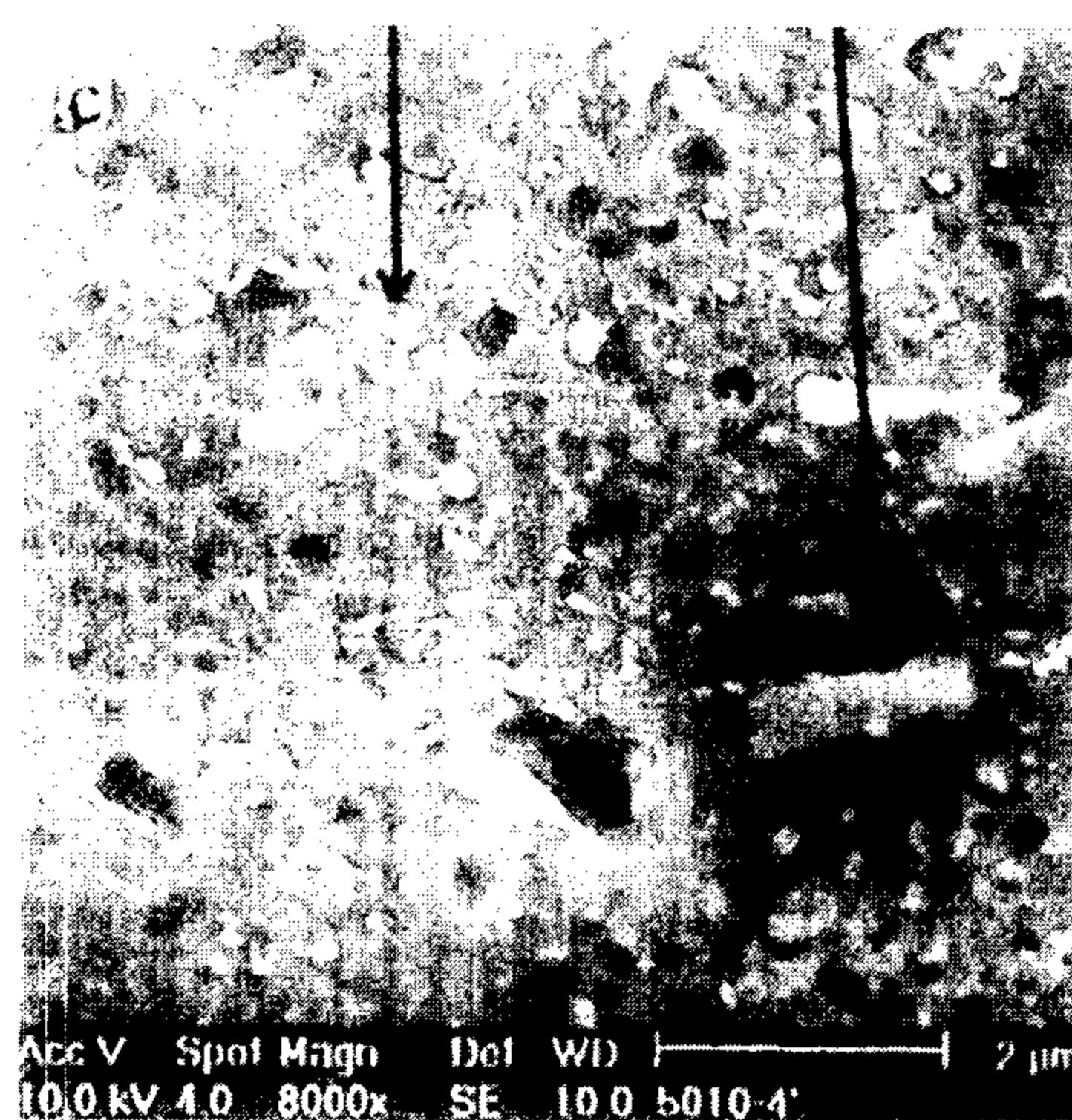


شکل ۴: نمونه ۶۰۶۳ شبیه سازی شده.

نتایج بررسی ریز ساختار با میکروسکوپ الکترونی روبشی

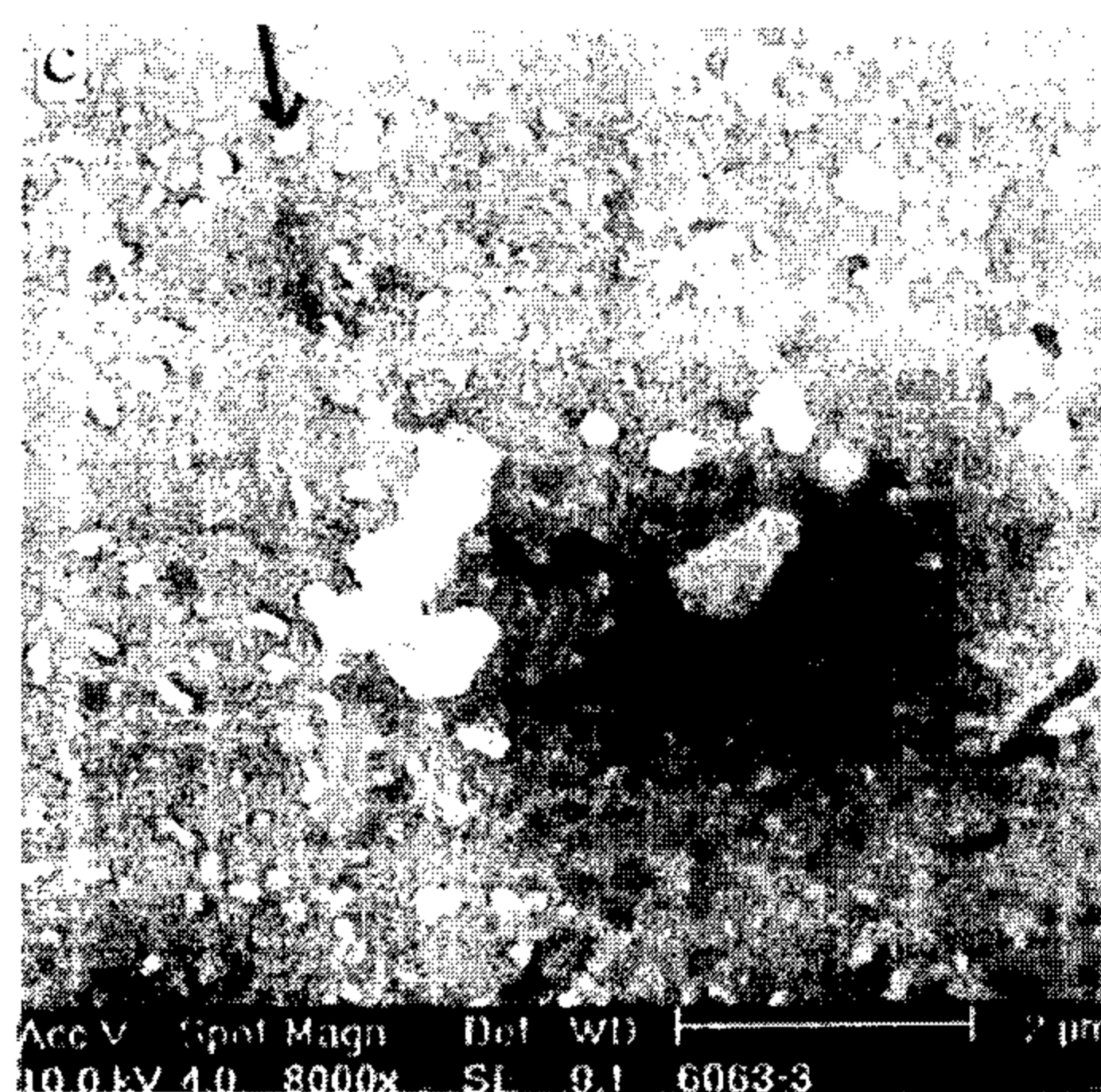
نتایج بررسی ریز ساختار با میکروسکوپ الکترونی روبشی در شکل (۱) و (۲) آمده است. نمونه ۵۰۱۰ از رسوبهای درشت $(Fe,Mn)Al_6$ و رسوب های ریز Al,Mn,Si,Fe در زمینه تشکیل شده است. نمونه ۶۰۶۳ نیز از رسوب های درشت Fe_3SiAl_{12} و رسوب های ریز Mg_2Si در زمینه تشکیل شده است.

Al,Mn,Fe,Si $(Fe,Mn)Al_6$



شکل ۱: تصویر SEM نمونه ۵۰۱۰ پرتودهی شده: رسوب درشت $(Fe,Mn)Al_6$ و رسوب ریز Al,Mn,Fe,Si .

Mg_2Si



شکل ۲: تصویر SEM نمونه ۶۰۶۳ پرتودهی شده: رسوب درشت Fe_3SiAl_{12} و رسوب ریز Mg_2Si .

جدول ۱: نتایج تحلیل گر تصویری نمونه ۵۰۱۰ و ۶۰۶۳ (آزمایشات تجربی).

شماره نمونه	قطر متوسط (mm)		درصد رسوب (%)		محیط رسوب (mm)		تعداد رسوب (#/mm ²)	
	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت
5010 نمونه	0.0131	0.0169	4.329	1.41	3.522	0.546	317	62
6063 نمونه	0.0120	0.026	3.339	1.003	2.046	0.371	294	18

جدول ۲: نتایج تحلیل گر تصویری نمونه ۵۰۱۰ و ۶۰۶۳ (آزمایشات شبه سازی).

شماره نمونه	قطر متوسط (mm)		درصد رسوب (%)		محیط رسوب (mm)		تعداد رسوب (#/mm ²)	
	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت	رسوب ریز	رسوب درشت
5010 نمونه	0.0150	0.0220	6.43	2.60	4.18	0.787	361	68
6063 نمونه	0.0130	0.0295	4.084	2.269	2.405	0.361	307	33

میکروساختار نمونه ۶۰۶۳ شبه سازی شده نیز از رسوب های درشت Fe_3SiAl_{12} و رسوب های ریز Mg_2Si در زمینه تشکیل شده است.

نتایج حاصل از تحلیل گر تصویری بر روی تصاویر شبه سازی

نتایج حاصل از تحلیل گر تصویری بر روی تصاویر شبه سازی در جدول (۲) نشان داده شده است و در بررسی توسط تحلیل گر تصویری قطر متوسط، محیط، مساحت و تعداد بر سطح رسوبات ریز و درشت اندازه گیری شد.

بحث

با توجه به نتایج بدست آمده از تحلیل گر تصویری مشاهده می شود که استفاده از روش مونت کارلو در شبه سازی میکروساختار یک روش قوی و کاربردی است. با مقایسه جدول (۱) و (۲) مشاهده می شود که اختلاف زیادی بین نتایج شبه سازی و تجربی وجود ندارد. همچنین می توان نتیجه گرفت که اختلاف موجود در نتایج نمونه ۵۰۱۰ حدود دو برابر نمونه ۶۰۶۳ می باشد.

مراجع

لازم به ذکر است که استفاده از ماتریس مثلثی به جای ماتریس مربعی نتیجه یکسان خواهد داشت. در مورد تعداد مقادیر استفاده شده در ماتریس Q هرچه از ۳۰ بیشتر شود ساختار ریزتری بدست می آید و بالعکس هرچه $Q < 30$ باشد ساختار درشت تری حاصل می شود. پس $Q = 30$ یک حالت بهینه برای این روش است. در ضمن هر چه تعداد مراحل روش مونت کارلو (MCS) بیشتر شود ساختار ریزتر خواهد شد. در اینجا یک حد متوسط (حالت بهینه) برای آزمایش $N = 1000000$ بدست آمد.

نتیجه گیری

در این تحقیق موارد زیر نتیجه گیری می شود:

۱- استفاده از روش مونت کارلو در شبه سازی میکروساختارها بر اساس کاهش انرژی آزاد در سیستم، به عنوان یک روش ساده و جذاب بسیار مفید خواهد بود.

۲- به عنوان یک روش ساده و جذاب بسیار مفید خواهد بود که روش مونت کارلوی استفاده شده را برای شبه سازی میکروساختار فلزات دیگر نیز استفاده کرد.

۳- حدس تابع احتمال $K = \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ ، حدس

بسیار خوبی برای این تحقیق می باشد.

- 2 – Anderson, M. P., Srolovitz, D. J., Grest, G. S. and Sahni, P. S. (1984). “Computer simulation of grain growth-I.” *Acta Metallurgica*, Vol. 32, P783.
- 3 – Anderson, M. P., Srolovitz, D. J., Grest, G. S. and Sahni, P. S. (1984). “Computer simulation of grain growth-II. Grain size distribution, topology local dynamics.” *Acta Metallurgica*, Vol. 32, P793.
- 4 – Li, M. Y. and Kannatey, E. (2002). “Monte carlo simulation of heat affected zone micostructure in laser-beam-welded nickle sheet.” *Welding Journal*, P. 37-S.