

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

**Εξέλιξη μικροδομής και μηχανικών ιδιοτήτων σε
ισόθερμες και μη ισόθερμες διεργασίες κραμάτων
αλουμινίου**

υπό

Σεραφείμ Αλέξανδρος

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των
απαιτήσεων για την απόκτηση του
Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

2013



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 11779/1
Ημερ. Εισ.: 16-12-2013
Δωρεά: Συγγραφέας
Ταξιθετικός Κωδικός: ΠΤ – ΜΜ
2013
ΣΕΡ

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

*Πρώτος Εξεταστής
(Επιβλέπων)* Δρ. Γ. Ν. Χαιδεμένοπουλος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Νικόλαος Αράβας
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο
Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Αλέξης Κερμανίδης
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Αυτή η διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο εργαστήριο Υλικών του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του πανεπιστημίου Θεσσαλίας. Για την επιτυχή ολοκλήρωση αυτής της εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω :

- Τον Καθηγητή κ.Γ.Χαιδεμένοπουλο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αναθέτοντας μου αυτήν την εργασία, την άρτια επίβλεψη καθώς και για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγηση κατά την εκπόνηση της καθώς και για όλη την εμπειρία που μου διοχέτευσε καθ' όλη την διάρκεια των σπουδών μου.
- Τον καθηγητή κ.Ν.Αράβα και τον επίκουρο καθηγητή κ.Α.Κερμανίδη, μέλη της τριμελούς επιτροπής , για τις χρήσιμες συμβουλές και παρατηρήσεις.
- Όλο το επιστημονικό προσωπικό του εργαστηρίου υλικών, και κυρίως, την Δρ Α.Ζερβάκη , την Δρ Ε.Καμούτση και την υποψήφια διδάκτωρ κ.Σαράφογλου.
- Όλους τους συμφοιτητές μου που έδειξαν ενδιαφέρον , με στήριξαν και μου παρείχαν ιδέες όλα αυτά τα χρόνια.
- Τέλος ιδιαιτέρως θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την συνεχή υποστήριξη τους και την κατανόηση που έδειξαν όλα αυτά τα χρονιά των σπουδών μου.

Βόλος, Ιούλιος 2013

1. Περίληψη

Η ισχυροποίηση στα θερμοσκληραινόμενα κράματα αλουμινίου (6xxx) προκύπτει από την καθίζηση της ενδομεταλλικής ένωσης Mg_2Si κατά την διαδικασία της γήρανσης. Η μικροδομή που δημιουργείται από την καθίζηση επηρεάζει τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού. Η πρόβλεψη μικροδομής (κατ' όγκο κλάσμα, μέγεθος σωματιδίων) μπορεί άμεσα να συσχετιστεί με τις μηχανικές ιδιότητες και να γίνει μια πρόβλεψη για αυτές.

Η πρόβλεψη της μικροδομής γίνεται με την χρήση του κινητικού μοντέλου Kampmann & Wagner (KWN). Το μοντέλο αυτό λαμβάνει υπόψη, του κατά την διάρκεια της ισόθερμης κατεργασίας, την ταυτόχρονη διεξαγωγή των μηχανισμών πυρήνωσης, ανάπτυξης και διεύρυνσης. Χρησιμοποιείται η εξίσωση της συνέχειας ή εξίσωση πληθυσμιακού ισοζυγίου (ΕΠΙ) στην στερεά κατάσταση η οποία περιλαμβάνει τους όρους της πυρήνωσης και της ανάπτυξης. Η διεύρυνση πραγματοποιείται φυσικά χωρίς κάποιο επιπρόσθετο όρο. Εισάγεται η αριθμητική μέθοδος της ημι-διακριτοποίησης για την παραγωγή του αριθμητικού μοντέλου το οποίο επιλύει την ΕΠΙ.

Αναπτύσσονται και περιγράφονται σχέσεις για τους ρυθμούς πυρήνωσης και ανάπτυξης και εισάγονται στην εξίσωση της συνέχειας. Αναλύονται οι βασικές παράμετροι του προβλήματος καθώς και το αριθμητικό μοντέλο το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση του προβλήματος. Στην συνέχεια παρουσιάζεται μια γενίκευση του συγκεκριμένου μοντέλου σε μη ισόθερμες κατεργασίες. Τέλος γίνεται εφαρμογή του μοντέλου στα εμπορικά κράματα 6061 και 6082 για τον υπολογισμό των μηχανικών ιδιοτήτων στην διεργασία της γήρανσης καθώς και σε συγκολλήσεις.

Με την χρήση του αριθμητικού μοντέλου είναι δυνατόν να πραγματοποιηθούν προσομοιώσεις στην διεργασία της τεχνητής γήρανσης της γραμμικής θέρμανσης και ψύξης καθώς και των συγκολλήσεων με αποτέλεσμα την πρόβλεψη της μικροδομής καθώς και των μηχανικών ιδιοτήτων. Έτσι μπορούν να επιλεγούν οι παράμετροι των διεργασιών αυτών ώστε να επιτύχουν οι επιθυμητές μηχανικές ιδιότητες καθώς και να προσδιοριστούν οι παράμετροι που μπορούν να οδηγήσουν σε σχεδιασμό νέων κραμάτων

Περιεχόμενα

1. Περίληψη	4
Πινάκας Σχημάτων	6
Εισαγωγή	7
3. Μεθοδολογία	8
3.1 Εξίσωση Πληθυσμιακού Ισοζυγίου	9
3.2 Πυρήνωση	10
3.3 Ανάπτυξη.....	12
3.4 Αριθμητικό Μοντέλο	13
3.5 Μη ισόθερμες Διεργασίες.....	16
3.6 Μοντέλο ισχυροποίησης με καθίζηση.....	17
3.7 Εφαρμογή του Μοντέλου στα κράματα 6061 και 6082	19
4. Αποτελέσματα.....	21
4.1 Γήρανση	21
4.2 Μη ισόθερμες διεργασίες (συγκόλληση)	31
4.3 Παρατηρήσεις	35
5. Συμπεράσματα - Παρατηρήσεις	35
6. Προτάσεις Για μελλοντική έρευνα	36
Βιβλιογραφία	37
Appendix.....	39
Πρόγραμμα ισόθερμης διεργασίας.....	39
Πρόγραμμα υπολογισμού σε μη ισόθερμες διεργασίες (συγκόλληση)	41
Υπορουτίνα υπολογισμού Πυρήνωσης, ρυθμού ανάπτυξης και δημιουργίας εξίσωσης πληθυσμιακού ισοζυγίου.	44
Υπορουτίνα υπολογισμού μέσης σύστασης στην μήτρα και κατ'ογκο κλάσμα	45
Υπορουτίνα υπολογισμού συνολικού αριθμού σωματιδίων, μέσης ακτίνας και σκληρότητας.	46

Πινάκας Σχημάτων

FIGURE 1: ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΡΟΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΤΗΣ ΚΑΤΑΝΟΜΗΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ	15
FIGURE 2: ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗ ΘΕΡΜΙΚΟΥ ΚΥΚΛΟΥ ΣΥΓΚΟΛΛΗΣΗΣ	16
FIGURE 3:ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 160 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=29 HR, 55 HR, 220 HR	22
FIGURE 4:ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 200 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=40 MIN, 2,5 HR, 22 HR	23
FIGURE 5: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 230 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=10 MIN, 1HR, 2,5 HR	24
FIGURE 6:ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6082 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 180 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=4,5 HR, 47,5HR, 197 HR	25
FIGURE 7:ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6082 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 220 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=20 MIN, 1HR, 3.5 HR	25
FIGURE 8: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6082 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ 260 C ΚΑΙ ΓΙΑ ΧΡΟΝΟΥΣ T=10 MIN, 30 MIN, 4,5 HR	26
FIGURE 9: ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΟΥ ΚΑΤ'ΟΓΚΟ ΚΛΑΣΜΑΤΟΣ ΤΗΣ ΕΝΩΣΗΣ Mg2Si ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061 ΜΕ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ T=230 C, T=200 C, T=160 C	27
FIGURE 10:ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΟΥ ΚΑΤ'ΟΓΚΟ ΚΛΑΣΜΑΤΟΣ ΤΗΣ ΕΝΩΣΗΣ Mg2Si ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6082 ΜΕ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ T=260 C, T=220 C, T=180 C	27
FIGURE 11:ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΗΣ ΜΕΣΗΣ ΑΚΤΙΝΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ , ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061 , ΓΙΑ ΤΡΕΙΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ T=230, 200, 160 C	28
FIGURE 12: ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΗΣ ΜΕΣΗΣ ΑΚΤΙΝΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ , ΤΟΥ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6082 , ΓΙΑ ΤΡΕΙΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ T=260, 220, 180 C	28
FIGURE 13: ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΗΣ ΣΚΛΗΡΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ ΓΙΑ ΤΟ ΚΡΑΜΑ 6061 ΚΑΙ ΤΡΕΙΣ ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ	29
FIGURE 14:ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΗΣ ΣΚΛΗΡΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ ΓΙΑ ΤΟ ΚΡΑΜΑ 6082 ΚΑΙ ΤΡΕΙΣ ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΕΣ	29
FIGURE 15: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΚΑΜΠΥΛΗ ΓΗΡΑΝΣΗΣ ΚΡΑΜΑΤΩΝ 6061 ΚΑΙ 6082 ΓΙΑ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ T=200 C.....	30
FIGURE 16: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕΣΗΣ ΑΚΤΙΝΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΚΡΑΜΑΤΩΝ 6061 ΚΑΙ 6082	30
FIGURE 17: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΚΛΑΣΜΑΤΟΣ ΟΓΚΟΥ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΚΡΑΜΑΤΩΝ 6061 ΚΑΙ 6082	31
FIGURE 18: ΘΕΡΜΙΚΟΣ ΚΥΚΛΟΣ ΚΑΙ ΤΩΝ 12 ΣΗΜΕΙΩΝ	32
FIGURE 19 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΣΚΛΗΡΟΤΗΤΑΣ ΣΥΓΚΟΛΛΗΣΗΣ ΚΡΑΜΑΤΟΣ 6061	32
FIGURE 20 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΤΙΜΩΝ ΣΚΛΗΡΟΤΗΤΑΣ ΣΥΓΚΟΛΛΗΣΗΣ	33
FIGURE 21 ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΜΕΣΗΣ ΑΚΤΙΝΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΑΠΟ ΤΟ ΚΕΝΤΡΟ ΤΗΣ ΣΥΓΚΟΛΛΗΣΗΣ.....	33
FIGURE 22 ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΑΡΙΘΜΟΥ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΑΠΟ ΤΟ ΚΕΝΤΡΟ ΤΗΣ ΣΥΓΚΟΛΛΗΣΗΣ.....	34
FIGURE 23 ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΚΛΑΣΜΑ ΟΓΚΟΥ ΜΕ ΤΗΝ ΑΠΟΣΤΑΣΗ	34

2. Εισαγωγή

Τα κράματα αλουμινίου σειράς 6xxx ισχυροποιούνται μέσω της κατεργασίας της τεχνητής γήρανσης κατά την οποία έχουμε καθίζηση της διμεταλλικής ένωσης Mg_2Si . Η γήρανση πραγματοποιείται ως εξής: Μετά την διέλαση το υλικό θερμαίνεται σε μια θερμοκρασία λίγο πιο πάνω από τους 500 C μέχρι να προκύψει ένα ομογενές στερεό διάλυμα. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται διαλυτοποίηση. Στην συνέχεια ακολουθεί απότομη ψύξη στην θερμοκρασία δωματίου και δημιουργείται ένα υπέρκορο στερεό διάλυμα. Αμέσως μετά το υλικό θερμαίνεται σε θερμοκρασία περίπου 200 C για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα (7-8 hr) ανάλογα και με τις ιδιότητες που πρέπει να επιτευχθούν. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται τεχνητή γήρανση.

Κατά την κατεργασία της τεχνητής γήρανσης πραγματοποιούνται μετασχηματισμοί φάσεων με πυρήνωση, ανάπτυξη και διεύρυνση που έχουν ως αποτέλεσμα την καθίζηση της δευτερεύουσας φάσης Mg_2Si . Οι τρεις παραπάνω μηχανισμοί, δεν δρουν ξεχωριστά αλλά πραγματοποιούνται ταυτόχρονα σχεδόν σε όλα τα στάδια της διεργασίας. Παρ'όλα αυτά είναι δυνατόν η διεργασία να χαρακτηριστεί από τρεις χρονικές περιόδους. Στην πρώτη χρονική περίοδο, κυρίως σε μικρούς χρόνους ο μηχανισμός της πυρήνωσης φαίνεται να υπερκαλύπτει τους άλλους δυο. Σε αυτήν την περίοδο δημιουργούνται οι πυρήνες μέσα στην μητρική φάση κάτω υπό την επίδραση της κίνουσας δύναμης για πυρήνωση η οποία εξαρτάται από τον υπερκορεσμό και την θερμοκρασία γήρανσης. Το μέγεθος των πυρήνων είναι ίσο με το κρίσιμο μέγεθος για πυρήνωση που εξαρτάται από την κινούσα δύναμη. Στην συνέχεια αυτοί οι πυρήνες αναπτύσσονται με διάχυση των συστατικών από την μήτρα στον πυρήνα με αποτέλεσμα την μείωση του υπερκορεσμού και συνεπώς μείωση της κίνουσας δύναμης για πυρήνωση. Γεγονός που οδηγεί στην δεύτερη περίοδο της διεργασίας κατά την οποία το κλάσμα όγκου των σωματιδίων προσεγγίζει την τιμή που προβλέπει η θερμοδυναμική ισορροπία με κυρίαρχο μηχανισμό την ανάπτυξη των σωματιδίων εφόσον ο ρυθμός πυρήνωσης έχει γίνει σχετικά μικρός. Μόλις το κλάσμα όγκου φτάσει αυτό που προβλέπεται από το διάγραμμα φάσεων αρχίζει να λαμβάνει χώρα η διεύρυνση των σωματιδίων. Κατά την διάρκεια αυτής της διεργασίας το κατ'όγκο κλάσμα παραμένει σταθερό και τα συστατικά από τα μικρότερα σωματίδια διαχέονται προς αυτά με μεγαλύτερο μέγεθος (λόγω φαινομένου Gibbs-Thomson) με αποτέλεσμα ο αριθμός των σωματιδίων να μειώνεται και το μέγεθος τους να αυξάνεται.

Οι παραπάνω διεργασίες έχουν ως αποτέλεσμα την διασπορά σωματιδίων στην μήτρα τα οποία περιγράφονται με μια κατανομή μεγέθους σωματιδίων. Αυτή η κατανομή προκύπτει από την επίλυση της Εξίσωσης Πληθυσμιακού ισοζυγίου λαμβάνοντας ταυτόχρονη διεξαγωγή των μηχανισμών πυρήνωσης ανάπτυξης και διεύρυνσης και κάνοντας κάποιες απλοποιητικές παραδοχές ώστε να μπορούν να εξαχθούν οι σχέσεις για την πυρήνωση και την ανάπτυξη οι οποίες εμπεριέχονται στην ΕΠΠ. Η πιο βασική παραδοχή είναι ότι θεωρείται το μοντέλο της άπειρης αραίωσης, δηλαδή ότι η διάχυση των συστατικών σε έναν πυρήνα δεν επηρεάζεται από την διάχυση συστατικών σε έναν γειτονικό πυρήνα. Η παραδοχή αυτή κάνει εφικτό τον υπολογισμό του ρυθμού ανάπτυξης με επίλυση της εξίσωσης διάχυσης για ένα σωματίδιο με μια άπειρη μήτρα να το περιβάλλει.

Στο πεδίο των μετασχηματισμών φάσεων με πυρήνωση, ανάπτυξη και διεύρυνση σε ισόθερμες αλλά και σε μη ισόθερμες διεργασίες λίγα είναι τα μοντέλα που προταθήκαν για να περιγράψουν την κατανομή των σωματιδίων με ταυτόχρονη διεξαγωγή και των 3 μηχανισμών. Αρχικά οι Lifshitz & Slyozov (1) μελέτησαν την ανάπτυξη και διεύρυνση σωματιδίων σε στερεά κατάσταση κάνοντας χρήση της εξίσωσης της συνέχειας για να προβλέψουν την κατανομή, θεωρώντας ότι αυτά σχηματίστηκαν με τον μηχανισμό των συνεχών μετασχηματισμών και όχι με την κλασσική θεωρία πυρήνωσης. Στην συνέχεια οι Langer & Schwartz (2) μελέτησαν την πυρήνωση και ανάπτυξη σταγόνων με απώτερο σκοπό να υπολογίσουν τον χρόνο διαχωρισμού δυο μιγμάτων. Οι Wagner & Kampmann (3) ήταν οι πρώτοι οι οποίοι πρότειναν ένα αριθμητικό

μοντέλο το οποίο λάμβανε υπόψη την ταυτόχρονη διεξαγωγή και των τριών φυσικών μηχανισμών. Αυτό το μοντέλο τροποποιήθηκε και χρησιμοποιήθηκε από πολλούς άλλους ερευνητές. Οι Myhr & Grong et.al. τροποποίησαν το μοντέλο KWN ώστε να εφαρμόσουν πεπερασμένες διαφορές (4) και να προβλέψουν την κατανομή σωματιδίων κατά την γήρανση κραμάτων αλουμινίου (5) καθώς και για χρονική εξέλιξη της μικροδομής στην θερμοεπιρεασμένη ζώνη των συγκολλήσεων (6). Στην συνέχεια οι Robson et.al. έκαναν χρήση του KWN για να υπολογίσουν κατανομή σωματιδίων κατά την καθίζηση κραμάτων Al-Zr (7), καθώς και για να προσδιορίσουν την επίδραση του Sc στον αριθμό των σωματιδίων στο κράμα Al-Zr-Sc (8). Επίσης χρησιμοποίησαν το μοντέλο KWN για να μελετήσουν την επίδραση τριών παραμέτρων (διεπιφανιακή ενέργεια, συντελεστής διάχυσης, υπερκορεσμός) στην κατανομή των σωματιδίων (9). Τέλος το μοντέλο KWN βρήκε μεγάλη εφαρμογή στις συγκολλήσεις τύπου FSW (10) όπου εφαρμόζεται παράλληλα με ένα θερμικό μοντέλο ή ένα επιπλέον μοντέλο μετασχηματισμού φάσεων ώστε να υπολογίσουν τις τελικές μηχανικές ιδιότητες του κράματος.

Στην παρούσα εργασία δόθηκε έμφαση στο μοντέλο KWN με απώτερο σκοπό τον υπολογισμό της κατανομής σωματιδίων σε ισόθερμες (γήρανση) και μη ισόθερμες διεργασίες (γραμμική θέρμανση-ψύξη συγκόλληση) των κραμάτων 6061 και 6082. Όσο αφορά τον ρυθμό πυρήνωσης χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο με εξάρτηση από τον χρόνο που στηρίζεται στην θεωρία Bocker-Doring. Ο ρυθμός πυρήνωσης/διαλυτοποίησης υπολογίστηκε επιλύοντας την εξίσωση της διάχυσης σε ισόθερμες συνθήκες και θεωρώντας σταθερό ρυθμό πυρήνωσης. Η εξίσωση Gibbs-Thomson εισήχθη στο μοντέλο ώστε αυτό να συμπεριλαμβάνει και την διεύρυνση. Τέλος ο συντελεστής διάχυσης θεωρήθηκε ανεξάρτητος της συγκέντρωσης και ότι η διάχυση ελέγχεται μόνο από το μαγνήσιο.

3. Μεθοδολογία

Όπως αναφέρθηκε και πιο πάνω σκοπός είναι ο υπολογισμός της κατανομής των σωματιδίων. Για αυτό τον λόγο θα χρησιμοποιηθεί η εξίσωση της συνέχειας ή Εξίσωση πληθυσμιακού ισοζυγίου η οποία εμπεριέχει τους όρους της πυρήνωσης και της ανάπτυξης. Για τις προσομοιώσεις επιλέχτηκαν δυο εμπορικά κράματα αλουμινίου της σειράς 6xxx το 6061 και 6082 όπου οι συστάσεις τους φαίνονται στον *πίνακα 1*

Κράμα	Mg	Si	Cu	Fe	Mn	Αναφορά
6061	0.9	0.8	0.3	0.7	0.15	(6)
6082	0.75	1	0.1	0.5	0.6	(11)

Table 1 : Χημικές συστάσεις κραμάτων (%wt)

Οι κύριες παραδοχές για την ανάπτυξη του μοντέλου είναι:

- Διαχυτικός μετασχηματισμός φάσεων
- Σταθεροί Συντελεστές διάχυσης
- Η Διάχυση ελέγχεται από το μαγνήσιο
- Αλληλεπιδράσεις μεταξύ μαγνησίου και άλλων στοιχείων αγνοούνται
- Άπειρη αραιώση της σύστασης του κράματος
- Όλα τα σωματίδια θεωρούνται σφαιρικά
- Τα σωματίδια έχουν στοιχειομετρία σύσταση
- Τα διαχυτικά πεδία γύρω από τα σωματίδια δεν επικαλύπτονται

3.1 Εξίσωση Πληθυσμιακού Ισοζυγίου

Σε πολλά προβλήματα μηχανικής απαιτείται να περιγράψουν πολυφασικά συστήματα με διεσπαρμένες φάσεις υπό την μορφή σωματιδίων (12) (13). Σε όλες τις περιπτώσεις ο στόχος είναι η πρόβλεψη της κατανομής μιας ή περισσοτέρων ιδιοτήτων οι οποίες χαρακτηρίζουν τις διεσπαρμένες ποσότητες και η εξίσωση του πληθυσμιακού ισοζυγίου είναι στην ουσία η αρχή διατήρησης των διεσπαρμένων ποσοτήτων στον αλγεβρικό χώρο των ιδιοτήτων αυτών περιγράφοντας την χρονική εξέλιξη τους. Στην προκειμένη περίπτωση αυτή η ποσότητα είναι η διάμετρος των σωματιδίων. Έτσι η εξίσωση πληθυσμιακού ισοζυγίου γράφεται στην εξής μορφή

$$\frac{dn(D,t)}{dt} + \frac{d[G(D,t)n(D,t)]}{dD} = \delta(D - D^*)S(t)$$

Με αρχικές συνθήκες : $n(D,0)=0$

Με συνοριακές : $n(0,t)=0$
 $n(D,t)=0$

Όπου $n(D,t)$ είναι ο αριθμός των σωματιδίων ανά διάμετρο $[\#/m^4]$

Όπου $G(D,t)$ είναι ο ρυθμός ανάπτυξης/διαλυτοποίησης $[m/s]$

Και $S(t)$ ρυθμός πυρήνωσης $[\#/m^3]$

Εφόσον το $n(D,t)$ περιγράφει κάποια κατανομή τότε ορίζονται και οι ροπές της κατανομής ως εξής

Τάξη ροπής	Όρισμα	Φυσικό νόημα
0-ταξη	$\mu_0 = \int_0^\infty n(D,t)dD$	Αριθμός σωματιδίων
1-ταξη	$\mu_1 = \int_0^\infty Dn(D,t)dD$	Άθροισμα διαμετρών σωματιδίων
2-ταξη	$\mu_2 = \int_0^\infty D^2n(D,t)dD$	Άθροισμα επιφανειών σωματιδίων
3-ταξη	$\mu_3 = \int_0^\infty D^3n(D,t)dD$	Κατά όγκο κλάσμα σωματιδίων

Table 2: Ροπές της κατανομής σωματιδίων

Οι παραπάνω ορισμοί έχουν ένα πολύ συγκεκριμένο φυσικό νόημα και μέσω αυτών προκύπτουν τα παρακάτω μεγέθη για την κατανομή των σωματιδίων:

Συνολικός Αριθμός Σωματιδίων : $N = \mu_0$,

Κλάσμα όγκου σωματιδίων: $f = \frac{\mu_3}{\mu_0}$,

Μέση διάμετρος σωματιδίων : $\bar{D} = \frac{\mu_1}{\mu_0}$

3.2 Πυρήνωση

Η πυρήνωση είναι μια διαδικασία κατά την οποία σχηματίζεται το μικρότερο δυνατό σωματίδιο στην νέα φάση που ονομάζεται πυρήνας. Πριν δημιουργηθεί ο πυρήνας υπάρχει το έμβryo το οποίο είναι ένα σωματίδιο μικρότερο σε μέγεθος από την κρίσιμη ακτίνα για πυρήνωση και εξελίσσεται σταδιακά σε πυρήνα μέσω της αποβολής και πρόσληψης ατόμων από και προς το εσωτερικό του. Με βάση την κινητική θεωρία δεν γίνονται όλα τα έμβρυα πυρήνες. Τα περισσότερα μετά την δημιουργία τους διαλυτοποιούνται ξανά στην μήτρα λόγω θερμικών διακυμάνσεων που υπάρχουν κοντά στην περιοχή της κρίσιμης ακτίνας. Ακόμα και σωματίδια τα οποία έχουν ξεπεράσει την κρίσιμη ακτίνα σε μέγεθος μπορεί να επαναδιαλυτοποιηθούν στην μήτρα. Άρα ο ρυθμός πυρήνωσης θα πρέπει να λαμβάνει υπόψη με κάποιο τρόπο τον χρόνο επώασης δηλαδή τον χρόνο που απαιτείται για να δημιουργηθεί ένας σταθερό πυρήνας σύμφωνα

με τους Becker-During (14). Με επίλυση του 2 νόμου του Fick για συγκέντρωση πυρήνων στην μήτρα και συντελεστή διάχυσης τον ρυθμό εισροής ατόμων μέσα στον πυρήνα προκύπτει η σχέση

$$S(t) = N_0 Z \beta^* \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{kT}\right) \exp\left(\frac{-t}{\tau}\right)$$

Όπου N_0 είναι τα σημεία ετερογενούς και ομογενούς πυρήνωσης, Z είναι ο παράγοντας Zeldovich μέσω του οποίου λαμβάνονται υπόψη οι θερμικές διακυμάνσεις κοντά στην κρίσιμη ακτίνα για πυρήνωση (14), k η σταθερά Boltzmann, β^* είναι ο ρυθμός με τον οποίο τα άτομα εισέρχονται στον κρίσιμο πυρήνα και δίνεται από την παρακάτω σχέση

$$\beta^* = \frac{4\pi R^{*2} D C_0}{a^4}$$

Όπου R^* είναι η κρίσιμη ακτίνα για πυρήνωση D ο συντελεστής διάχυσης και C_0 η ονομαστική σύσταση του κράματος. Το ΔG^* αποτελεί το ενεργειακό φράγμα για πυρήνωση και δίνεται από τον τύπο

$$\Delta G^* = \frac{\Delta G_0}{\ln^2\left(\frac{C}{C_{eq}}\right)}$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι το ΔG_0 είναι μια ρυθμιζόμενη μεταβλητή η οποία εμπεριέχει όλους τους παράγοντες που αποτελούν το ενεργειακό φράγμα (θερμοδυναμικούς και μηχανικούς). Το τ αποτελεί τον χρόνο επώασης ο οποίος εισάγει στον τύπο της πυρήνωσης το χρονικό διάστημα για την επίτευξη σταθερών συνθηκών πυρήνωσης

$$\tau = \frac{1}{2\beta^* Z^2}$$

Για τον υπολογισμό της κρίσιμης ακτίνας για πυρήνωση γίνεται επίλυση της εξίσωσης Gibbs-Thomson για $C_i = \bar{C}$:

$$C_i = C_e \exp\left(\frac{2\gamma V_m}{rRT}\right)$$

$$r_c = \frac{2\gamma V_m}{RT} \left(\ln \left(\frac{\bar{C}}{C_{eq}} \right) \right)^{-1}$$

Όπου \bar{C} είναι η μέση συγκέντρωση συστατικού στην μήτρα και C_{eq} είναι η σύσταση ισορροπίας. Όπως αναφέρθηκε στις παραδοχές όλες οι συστάσεις αναφέρονται στο μαγνήσιο. Η σύσταση ισορροπίας δίνεται από το ψευδοδιμερές διάγραμμα φάσεων της ένωσης Mg_2Si (6):

$$C_{mg} (\%) = 290 \exp\left(\frac{-41000}{RT}\right)$$

3.3 Ανάπτυξη

Στον υπολογισμό του ρυθμού ανάπτυξης γίνεται η παραδοχή ότι **α)** υπάρχει άπειρη αραίωση στο μίγμα **β)** ότι η διάχυση ελέγχεται από το πιο αργό συστατικό που είναι το Mg. Με αυτές τις παραδοχές γίνεται επίλυση της εξίσωσης διάχυσης τόσο σε σταθερή ακαταστασία όσο και σε μεταβατική με 2 επιπλέον παραδοχές, ότι ο συντελεστής διάχυσης παραμένει σταθερός και ότι η θερμοκρασία είναι σταθερή όποτε προκύπτει (15)

$$\frac{dC}{dt} = \frac{D}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC}{dr} \right)$$

Με αρχικές και συνοριακές συνθήκες

$$C(r, 0) = \bar{C} \quad \text{Αρχική Συνθήκη}$$

$$C(r, t) = C_i \quad \text{Σύσταση στην επιφάνεια}$$

$$C(\infty, t) = \bar{C} \quad \text{Σύσταση στην μήτρα}$$

Για σταθερή κατάσταση

$$G = \frac{\bar{C} - C_i}{C_p - C_i} \frac{D}{r}$$

Για μεταβατική κατάσταση

$$G = \frac{\bar{C} - C_i}{C_p - C_i} \left(\frac{D}{r} + \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \right)$$

Όπου το C_i δίνεται από την εξίσωση Gibbs-Thomson. Όποτε σύμφωνα με την εξίσωση Gibbs-Thomson την κρίσιμη ακτίνα όλα τα σωματίδια με $r < r_c$ θα διαλυτοποιούνται ενώ όλα όσα έχουν $r > r_c$ θα αναπτύσσονται.

Η συγκέντρωση στην μήτρα \bar{C} προκύπτει από ένα απλό ισοζύγιο μάζας

$$\bar{C} = \frac{C_0 - fC_p}{1 - f}$$

3.4 Αριθμητικό Μοντέλο

Η Επέστην γενική περίπτωση είναι αδύνατον να επιλυθεί αναλυτικά όποτε είναι αναγκαίος ο αριθμητικός υπολογισμός της. Στην βιβλιογραφία έχουν χρησιμοποιηθεί αρκετές τεχνικές ώστε να επιτευχτεί αυτό με της πιο κύριες να είναι οι εξής:

- Οι πεπερασμένες διαφορές είναι μια πολύ δημοφιλής προσέγγιση για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων. Ανάλυση της αποδοτικότητας και σύγκρισης μεταξύ διαφόρων σχημάτων για την ΕΠΙ έχει παρουσιάσει από τους Barnett & Rohani (16). Το κύριο μειονέκτημα των μεθόδων των πεπερασμένων διαφορών είναι ότι η διατήρηση και της μάζας των σωματιδίων επιτυγχάνεται με πολύ μεγάλη διαλυτοποίηση του χωριού επίλυσης, με δεδομένο ότι ο υπολογισμός των ροπών είναι κρίσιμος αφού συνδέεται με άμεσα μετρήσιμες ποσότητες. Μια δεύτερη δυσκολία απορεί από την υπερβολική μορφή της διαφορικής εξίσωσης γεγονός που προκαλεί αριθμητική διάχυση στις προσομοιώσεις.
- Η μέθοδος των σταθμισμένων υπολοίπων είναι μια γενική μέθοδος επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων, σύμφωνα με την οποία σχηματίζεται ένα σύστημα αλγεβρικών διαφορικών εξώσεων με αγνώστους τους συντελεστές που σχηματίζουν την λύση υπό την μορφή ενός αναπτύγματος σε σειρά δεδομένων συναρτήσεων (συναρτήσεις βάσης). Πιθανές επιλογές συναρτήσεων βάρους αποτελούν οι συναρτήσεις Dirac ενώ εάν επιλεγούν ίδιες συναρτήσεις βάσης και βάρους οδηγούν σε μεθόδους Galerkin (17) (18). Η μέθοδος αυτή είναι πολύ ευέλικτη και έχει ικανοποιητική σύγκλιση ωστόσο είναι πολύ απαιτητική υπολογιστικά και πιο δύσκολη στην εφαρμογή.

Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω χρησιμοποιείται η τεχνική της ημί-διακριτοποίησης για την επίλυση του προβλήματος. Σύμφωνα με αυτήν την μέθοδο μια μερική διαφορική εξίσωση 2 μεταβλητών διακριτοποιείται μόνο στην μια διεύθυνση (χωρική μεταβλητή) με αποτέλεσμα να προκύπτει ένα σύστημα συνηθών διαφορικών εξισώσεων ως προς την μεταβλητή που παρέμεινε

συνεχής (19) (χρονική). Στην συγκεκριμένη περίπτωση διακριτοποιείται η μεταβλητή της διαμέτρου. Έστω ότι επιλέγονται h διαστήματα διαλυτοποίηση. Έτσι η ΕΠΙ μετασχηματίζεται σε ένα σύστημα n επί n εξισώσεων με αγνώστους. Πιο συγκεκριμένα

$$\frac{dN_i}{dt} = -n(D,t)G(D,t)_{D_{i+1}} + n(D,t)G(D,t)_{D_i} + \delta_{ij}S(t)$$

Το δέλτα του Kronecker ορίζει το διάστημα που θα λάβει χώρα η πυρήνωση.

Για να επιλυθεί αυτό το σύστημα πρέπει να είναι γνωστές οι τιμές στα άκρα του κάθε διαστήματος. Αυτές προκύπτουν από την παραδοχή ότι θα πρέπει να υπάρχει συνέχεια στο φαινόμενο κατά την διαλυτοποίηση.

$$n(D,t)G(D,t)_{D_i} = \frac{N_{i-1}}{h} G(D_i,t) \quad \text{για } G(D,t) > 0 \quad \text{Ανάπτυξη}$$

$$n(D,t)G(D,t)_{D_i} = \frac{N_i}{h} G(D_i,t) \quad \text{για } G(D,t) < 0 \quad \text{διαλυτοποίηση}$$

Για διαλυτοποίηση η ΕΠΙ μετασχηματίζεται ως εξής

$$\frac{dN_i}{dt} = -\frac{N_{i+1}}{h} G(D_{i+1},t) + \frac{N_i}{h} G(D_i,t)$$

Προφανώς ο ορός της πυρήνωσης στην περίπτωση της διαλυτοποίηση είναι μηδέν. Η διαδικασία που ακολουθείτε για να υπολογιστεί η κατανομή παρουσιάζεται στο διάγραμμα ροής στο σχήμα 1. Στις παρενθέσεις αναφέρονται οι υπορουτίνες που χρησιμοποιούνται και παρουσιάζονται στο παράρτημα. Για την επίλυση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιήθηκε η υπορουτίνα του Matlab ode15s η οποία χρησιμοποιεί το backward differantion model για να επιλύσει άκαμπτα προβλήματα (stiff).

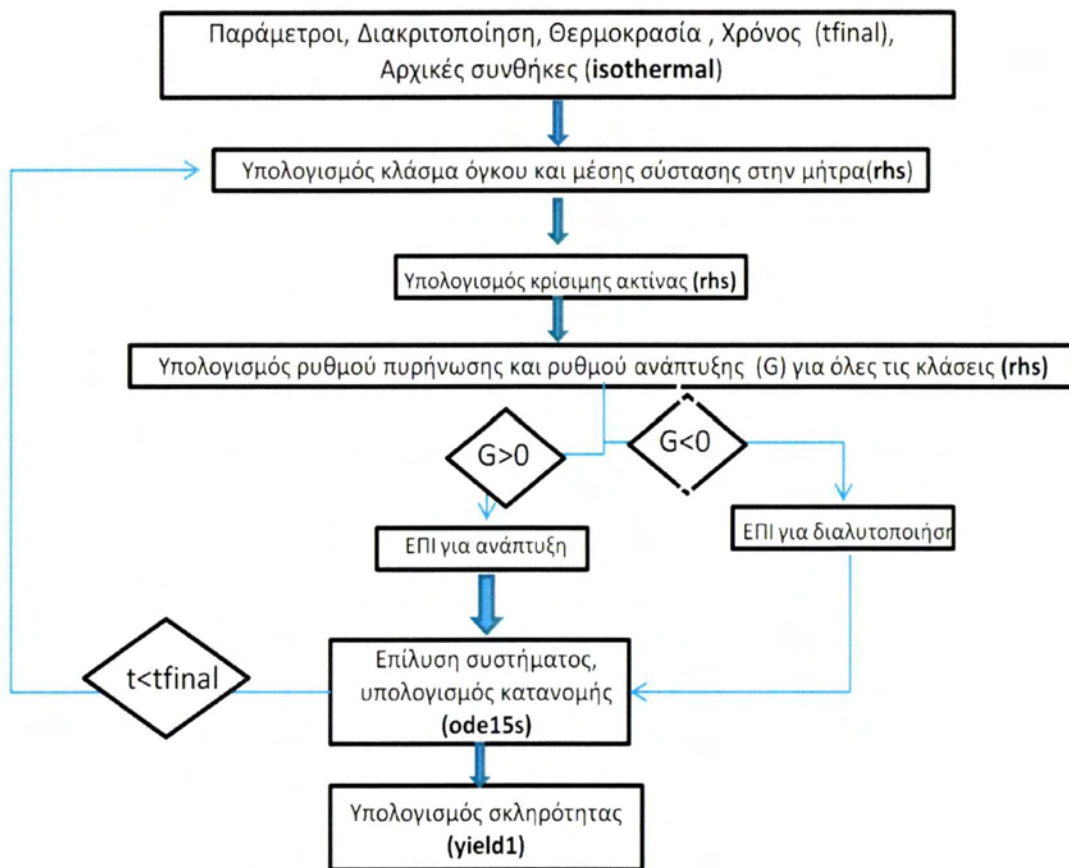


Figure 1: Διάγραμμα ροής υπολογισμού της κατανομής σωματιδίων

3.5 Μη ισόθερμες Διεργασίες

Το παραπάνω μοντέλο έχει εφαρμοστεί σε μεγάλο βαθμό όχι μόνο σε ισόθερμες και αλλά και μη-ισόθερμες διεργασίες (10) (6) (5). Στην βιβλιογραφία το πρόβλημα της πρόβλεψης της μικροδομής σε μη ισόθερμες διεργασίες προσεγγίζεται ολοκληρωτικά, δηλαδή γίνεται χρήση μοντέλων τα οποία προβλέπουν την πιθανή διαλυτοποίηση καθώς και διεύρυνση στο τέλος της διεργασίας χωρίς να υπολογίζουν την κατανομή σωματιδίων και μέση ακτίνα στους ενδιάμεσους χρόνους. Για να συμβεί αυτό πρέπει να τηρούνται οι προϋποθέσεις της ισοκινητικής αντίδρασης (6). Στην παρούσα μελέτη δεν χρησιμοποιήθηκε η παραπάνω τακτική αλλά έγινε μια προσπάθεια να υπολογιστεί η κατανομή σωματιδίων σε ολόκληρο τον θερμικό κύκλο. Αυτό επιτεύχθηκε με την διακριτοποίηση του θερμικού κύκλου σε τμήματα ισόθερων όπως φαίνεται στην εικόνα 1.

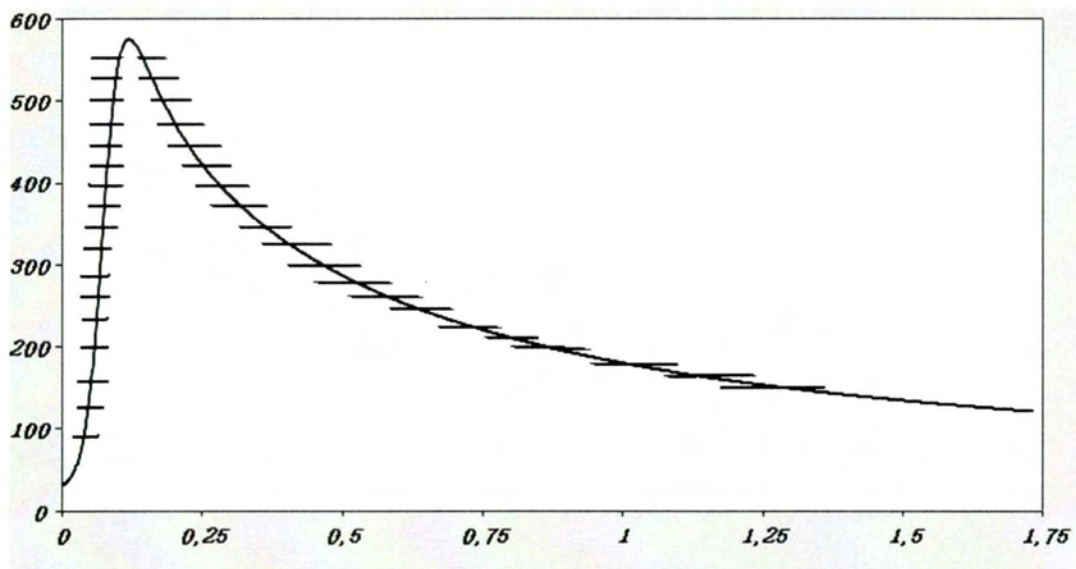


Figure 2: Διακριτοποίηση θερμικού κύκλου συγκόλλησης

Σε κάθε ισόθερμο τμήμα του θερμικού κύκλου θεωρούνται συνθήκες θερμοδυναμικής ισορροπίας και εφαρμόζεται το παραπάνω μοντέλο με χρονικό ορίζοντα που προκύπτει από το μέγεθος της διακριτοποίησης. Με αυτόν τον τρόπο επιτυγχάνεται μια συνεχή επίλυση για όλα τα σημεία του θερμικού κύκλου όπου το κάθε σημείο τροφοδοτείται με τα αποτελέσματα του μοντέλου από το προηγούμενο του.

3.6 Μοντέλο ισχυροποίησης με καθίζηση

Στα θερμοσκληραινόμενα κράματα αλουμινίου η συνολική ισχυροποίηση προέρχεται από 5 μηχανισμούς : την πλεγματική αντίσταση σ_i , την εργοσλήρυνση σ_{WH} , την ισχυροποίηση από σύνορα κόκκων σ_{GB} , την ισχυροποίηση στέρεου διαλύματος σ_{SS} και την ισχυροποίηση από καθίζηση σ_p . Το συγκεκριμένο μοντέλο στοχεύει να περιγράψει την χρονική μεταβολή του ορίου διαρροής (η σκληρότητας) κατά τις θερμικές κατεργασίες και διεργασίες κραμάτων αλουμινίου λαμβάνοντας υπόψη την κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, το κλάσμα όγκου καθώς και την μέση ακτίνα των σωματιδίων (20). Το συνολικό όριο διαρροής δίνεται από τον εξής τύπο:

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_{WH} + \sigma_{GB} + \sigma_{ss} + \sigma_p$$

Η ισχυροποίηση από στερώ διάλυμα εξαρτάται από την μέση συγκέντρωση κάθε στοιχείου στην μήτρα και δίνεται από τον τύπο (11)

$$\sigma_{ss} = \sum K_j \bar{C}_j$$

Η ισχυροποίηση με καθίζηση εξαρτάται από την μέση ανάσταση εμποδίου F σύμφωνα με την παρακάτω σχέση (4) (10) (21)

$$\sigma_p = \frac{M \bar{F}}{bl}$$

Όπου M είναι ο παράγοντας Taylor, b είναι το μέγεθος του διανύσματος burgers και l είναι η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων στο επίπεδο ολίσθησης. Επιπλέον αν το l εκφραστεί με Όρους μέσου μεγέθους σωματιδίου και κατ' όγκων κλάσμα χρησιμοποιώντας τον στατιστικό φορμαλισμό του Frieda προκύπτει:

$$\sigma_p = \frac{M}{br} (2\beta G b^2)^{-1/2} \sqrt{\frac{3f}{2\pi}} F^{-3/2}$$

Η τιμή της αντίστασης εμποδίου εξαρτάται από το αν το σωματίδιο είναι διατιμήσιμο η μη-διατιμήσιμο Στην περίπτωση όπου το σωματίδιο είναι διατιμήσιμο δηλαδή η ακτίνα του είναι μικρότερη από την κρίσιμη ακτίνα για διάτμηση τότε το F είναι ανάλογο της ακτίνα του σωματιδίου (21):

$$F_i = 2\beta G b^2 \frac{r_i}{r_c}$$

Όταν το σωματίδιο δεν είναι διατμήσιμο τότε η αντίσταση δεν εξαρτάται από την ακτίνα και δίνεται από τον εξής τύπο:

$$F_i = 2\beta G b^2$$

Στην γενική περίπτωση ο πληθυσμός των σωματιδίων αποτελείται από διατμήσιμα και μη-διατμήσιμα σωματίδια όποτε η μέση αντίσταση των εμποδίων εκφράζεται ως εξής:

$$F = \frac{\int_0^{\infty} n(D,t)F(D)dD}{\int_0^{\infty} n(D,t)dD} = \frac{\sum_{i=1}^k N_i F_i}{\sum_{i=1}^k N_i}$$

Θέτοντας

$$k_p = 2\beta G b M \sqrt{\frac{3}{2\pi}}$$

Προκύπτει για σωματίδια με $r < r_c$

$$\sigma_p = k_p \frac{\sqrt{f}}{r} \left(\frac{\sum_{i=1}^k N_i F_i}{\sum_{i=1}^k N_i} \right)^{3/2}$$

Ενώ για $r > r_c$

$$\sigma_p = k_p \frac{\sqrt{f}}{r}$$

Οι παραπάνω σχέσεις μας επιτρέπουν να προβλέψουμε την χρονική μεταβολή του ορίου διαρροή μέσω του κλάσμα όγκου f και της μέσης ακτίνας r . Αξίζει να σημειωθεί ότι το k_p καθώς και οι υπόλοιποι οροί του ορίου διαρροής αντιμετωπίζονται ως ρυθμιζόμενες μεταβλητές όπου η τιμή τους προκύπτει από πειραματικά δεδομένα καμπύλης γήρανσης (11).

Για να μετατρέψουμε το όριο διαρροής σε σκληρότητα χρησιμοποιείται ο παρακάτω τύπος (6):

$$HV=0.33*\sigma_y+16$$

3.7 Εφαρμογή του Μοντέλου στα κράματα 6061 και 6082

Για τον έλεγχο του μοντέλου οι προβλέψεις συγκρίνονται με δεδομένα σκληρότητας από την βιβλιογραφία. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν κατά τις προσομοιώσεις για το κινητικό μοντέλο δίδονται από τον πίνακα 3 και για το μοντέλο ισχυροποίησης στον πίνακα 4

Cp(% wt)	63.4	Συγκέντρωση Mg στην Mg ₂ Si	Από [5]
α(m)	4.04x10 ⁻¹⁰	Σταθερά πλέγματος	
Z	0.05	Παράγοντας Zeldovich	Από [13]
D0(m ² /s)	2.2x10 ⁻⁴	Προ εκθετικός όρος συντελεστή διάχυσης	Από[5]
Q0(J/mol)	130000	Ενέργεια ενεργοποίησης για διάχυση	Από [5]
k	1.38x10 ⁻²³	Σταθερά Boltzman	
R(J/molK)	8.314	Παγκόσμια σταθερά αερίων	
γ(J/m ²)	0.5	Επιφανειακή ενέργεια	Από [19]
Vm	3.84x10 ⁻⁵	Μοριακός όγκος	Από [19]
N0 (6061)	3x10 ¹⁹	Σημεία πυρήνωσης	Ρυθμιζόμενη μεταβλητή
ΔG0 (6061)	2.02x10 ⁻¹⁹	Όρος ενεργειακού φράγματος	(10)
N0 (6082)	2x10 ²⁰	Σημεία πυρήνωσης	Ρυθμιζόμενη μεταβλητή
ΔG0 (6082)	1.01x10 ¹⁹	Όρος ενεργειακού φράγματος	(10)

Table 3: Δεδομένα για κινητικό μοντέλο

Παράμετρος	Τιμή	Περιγραφή	Αναφορά
r_c	5×10^{-9}	Κρίσιμη ακτίνα για διάτμηση	(4)
σ_0 (6061) Mpa	70	Σταθερός ορός μοντέλου ισχυροποίησης	(4) (11)
σ_0 (6082) Mpa	27	Σταθερός ορός μοντέλου ισχυροποίησης	(4) (11)
k_{si}	66.3	Ισχυροποίηση στερεού διαλύματος πυριτίου	(4) (11)
k_{mg}	29	Ισχυροποίηση στερεού διαλύματος μαγνησίου	(4) (11)
k_{ppt} (6061)	$7.4 \cdot 10^{-6}$	Ισχυροποίηση καθίζησης	(5)
k_{ppt} (6082)	$9 \cdot 10^{-6}$	Ισχυροποίηση καθίζησης	(5)

Table 4: Πινάκας σταθερών μοντέλου ισχυροποίησης

Γενικά στην βιβλιογραφία παρατηρείται έλλειψη τιμών για παραμέτρους που αφορούν την μικροδομή (επιφανειακή ενεργεία σωματιδίων μήτρας, θερμοδυναμική δεδομένα μετασταθών φάσεων, πυκνότητα θέσεων πυρήνωσης, κινούσα δύναμη για πυρήνωση) και την αλληλεπίδραση των αταξιών με την μικροδομή. Για αυτό τον λόγο χρησιμοποιήθηκαν προσεγγιστικές τιμές από την βιβλιογραφία ενώ για τα θερμοδυναμικά δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν άπλα μοντέλα για να προσδιοριστούν οι τιμές τους. Ωστόσο η μη ακριβής γνώση των παραμέτρων και η ανάγκη εισαγωγής παραδοχών στους μαθηματικούς υπολογισμούς, λόγω της πολυπλοκότητας των φυσικών φαινομένων οδήγησαν τους ερευνητές σε διάφορες τεχνικές για την πρόβλεψη της χρονικής εξέλιξης της μικροδομής σε θερμικές κατεργασίες:

- Χρήση πειραματικών δεδομένων για την περιγραφή της χρονικής εξέλιξης της μικροδομής συγκριτικά με αυτά τα δεδομένα. Οι Myhr & Grong χρησιμοποίησαν πειραματικές τιμές μικροσκληρότητας για να περιγράψουν την μείωση της σε συγκολλήσεις κραμάτων αλουμινίου
- Μέτρηση της χρονικής εξέλιξης της μικροδομής, προσαρμογή γνωστών εξισώσεων όπως η εξίσωση Johnson-Mehl-Avrami για το κατ' όγκο κλάσμα και στην συνέχεια προσαρμογή μοντέλων μηχανικών ιδιοτήτων σε πειραματικά δεδομένα.
- Θεώρηση παραμέτρων για τις οποίες υπάρχει άγνοια τις τιμές τους ως ρυθμιζόμενες με σκοπό την καλύτερη περιγραφή των πειραματικών δεδομένων. Έτσι στην βιβλιογραφία έχουν χρησιμοποιηθεί ως ρυθμιζόμενες μεταβλητές οι παράμετροι πυρήνωσης, θερμοδυναμικά δεδομένα, επιφανειακή ενεργεία και παράμετροι στην περιγραφή μηχανικών ιδιοτήτων.

Στην συγκεκριμένο μοντέλο θεωρηθήκαν 3 ρυθμιζόμενες μεταβλητές: N_0 , ΔG_0 , k_{pp} . Η τιμή αυτών των μεταβλητών προσδιορίζεται με βάση τα πειραματικά δεδομένα από την βιβλιογραφία καθώς και βασικές θερμοδυναμικές/κινητικές σχέσεις όπως η θεωρία LSW.

4. Αποτελέσματα

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την γήρανση κραμάτων αλουμινίου σε διάφορους χρόνους και θερμοκρασίες καθώς και η σύγκριση τους με πειραματικές τιμές. Επίσης παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την προσομοίωση της συγκόλλησης παράλληλα με τα πειρατικά δεδομένα.

4.1 Γήρανση

Για την διεργασία της γήρανσης χρησιμοποιήθηκαν δυο κράματα (6061 & 6082) των οποίων η σύσταση φαίνεται στο πινάκα 2. Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε για 3 διαφορετικές θερμοκρασίες γήρανσης για το κάθε κράμα (160 C , 200 C, 230 C για το 6061 και 180 C, 220 C, 260 C για το 6082). Ο χρόνος προσομοίωσης ήταν ίδιος και για τα δυο κράματα και ίσος με 10^7 s (115 days). Στα πρώτα έξι σχήματα (Figure 2-6) παρουσιάζεται η κατανομή μεγέθους σωματιδίων για τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες. Οι τρεις καμπύλες αντιστοιχούν σε τρεις χαρακτηριστικούς χρόνους της διεργασίας. Η πρώτη καμπύλη (μικρότερος χρόνος) αντιστοιχεί στα πρώτα στάδια του μετασχηματισμού όπου η πυρήνωση είναι κυρίαρχη, η δεύτερη καμπύλη αντιστοιχεί σε χρόνο όπου εμφανίζεται η μεγίστη σκληρότητα για την δεδομένη θερμοκρασία ενώ η τρίτη καμπύλη αντιστοιχεί σε χρονικό στάδιο όπου η διεύρυνση έχει λάβει χώρα και είναι ο κυρίαρχος μετασχηματισμός. Είναι εμφανές σε κάποια από τις κατανομές εμφανίζεται το φαινόμενο της διπλής κορυφής (εικόνα 2 και εικόνα 3). Η διπλή κορυφή προκύπτει λόγω του φαινομένου Gibbs-Thomson. Στα αρχικά στάδια του μετασχηματισμού ο ρυθμός πυρήνωσης έχει την μεγίστη τιμή του και σχεδόν όλα τα σωματίδια έχουν ακτίνα ίση με την κρίσιμη ακτίνα για πυρήνωση. Αυτά τα σωματίδια έχουν μικρό ρυθμό ανάπτυξης λόγω της υψηλής επιφανειακής συγκέντρωσης. Αυτό το γεγονός οδηγεί στην πρώτη κορυφή. Με την πάροδο του χρόνου αυτά τα σωματίδια αυξάνουν σε μέγεθος και έτσι σε συνδυασμό με την υψηλή και σταθερή τιμή του ρυθμού πυρήνωσης παρουσιάζονται δυο κορυφές στην κατανομή. Αυτό το φαινόμενο δεν παρατηρείται σε υψηλές θερμοκρασίες (Εικόνα 7) λόγω της μείωσης του ρυθμού πυρήνωσης από την υψηλή θερμοκρασία που οδηγεί σε χαμηλό υπερκορεσμό καθώς και από την αύξηση της κρίσιμης ακτίνας για πυρήνωση που οδηγεί σε μεγαλύτερα σωματίδια τα οποία αποκτούν μεγαλύτερο ρυθμό ανάπτυξης.

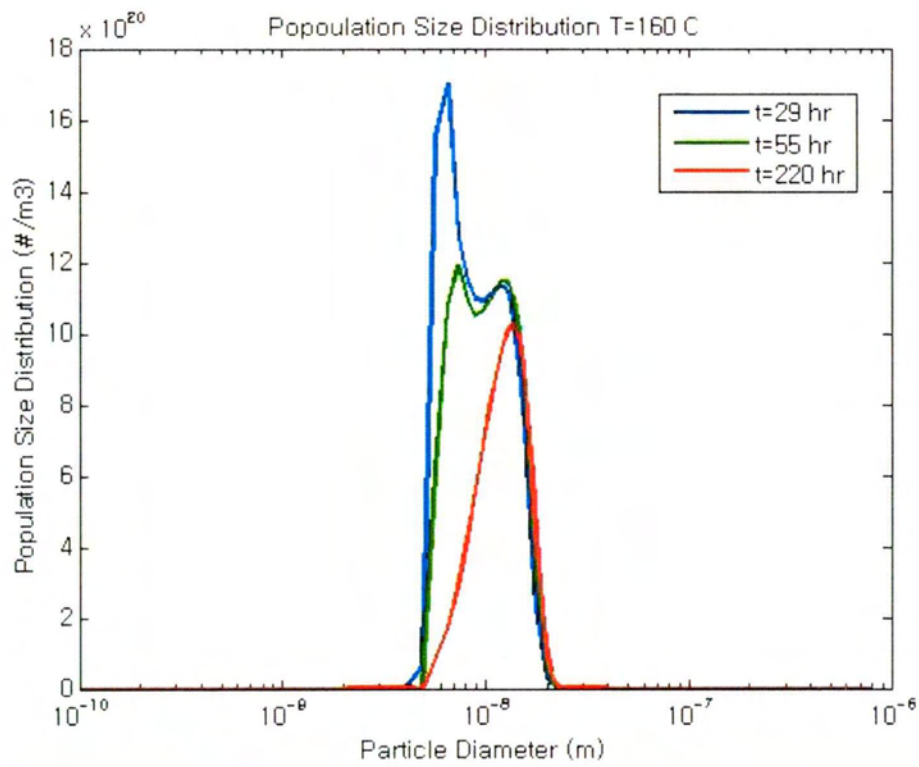


Figure 3: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του κράματος 6061 για θερμοκρασία 160 C και για χρόνους t=29 hr, 55 hr, 220 hr



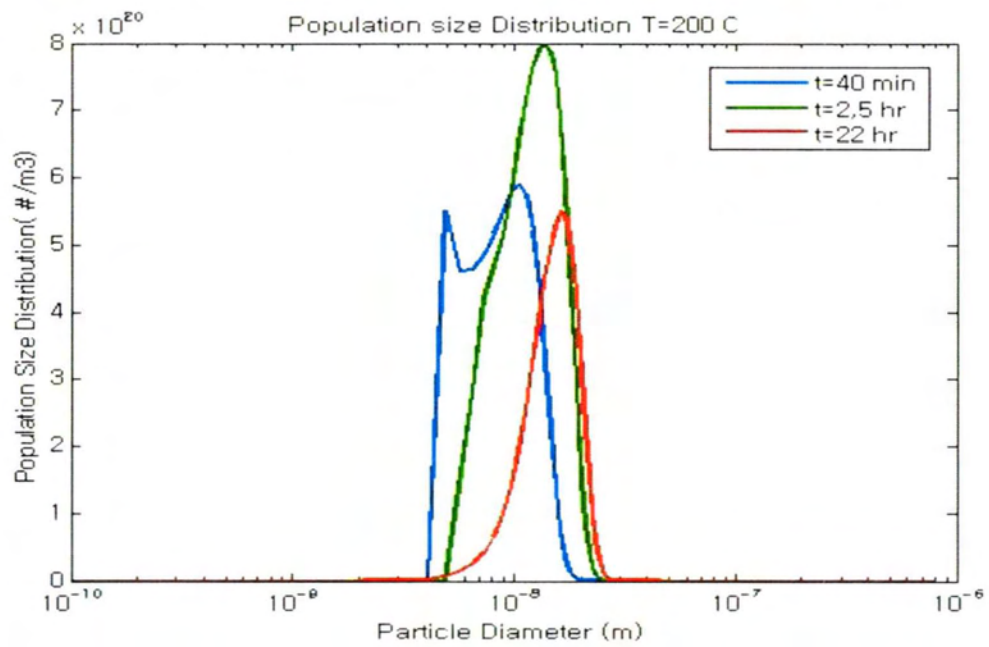


Figure 4: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του κράματος 6061 για θερμοκρασία 200 C και για χρόνους t=40 min, 2,5 hr, 22 hr

Το φαινόμενο της διπλής κορυφής είναι χρήσιμο να παρακολουθείτε όπου εμφανίζεται καθώς σε ένα διάγραμμα παρουσιάζει προσεγγιστικά το μέγεθος της κρίσιμης ακτίνας, σε τι βαθμό γίνεται η πυρήνωση καθώς και μια αίσθηση του ρυθμού ανάπτυξης.

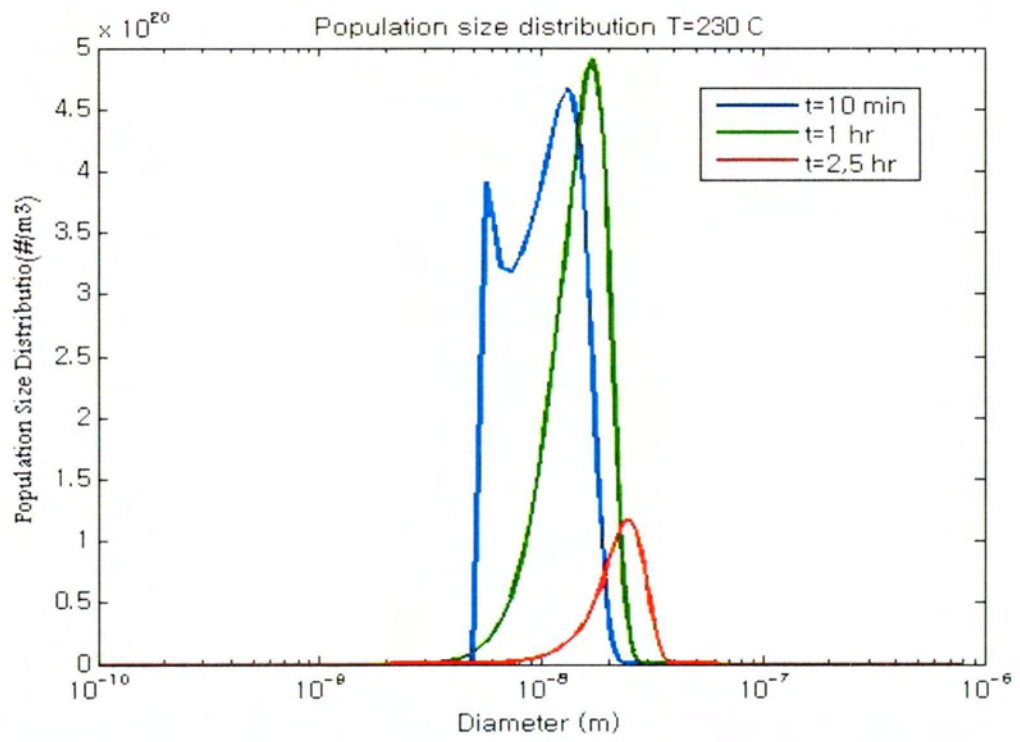


Figure 5: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του κράματος 6061 για θερμοκρασία 230 C και για χρόνους t=10 min, 1hr, 2,5 hr

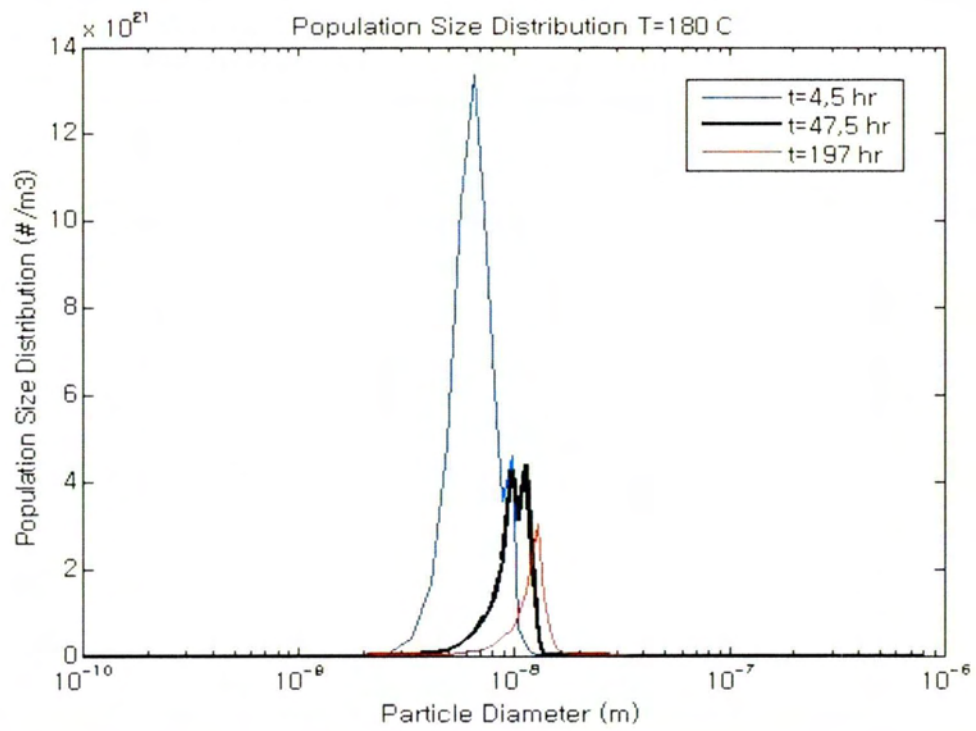


Figure 6: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του [κράματος 6082](#) για θερμοκρασία 180 C και για χρόνους t=4,5 hr, 47,5hr, 197 hr

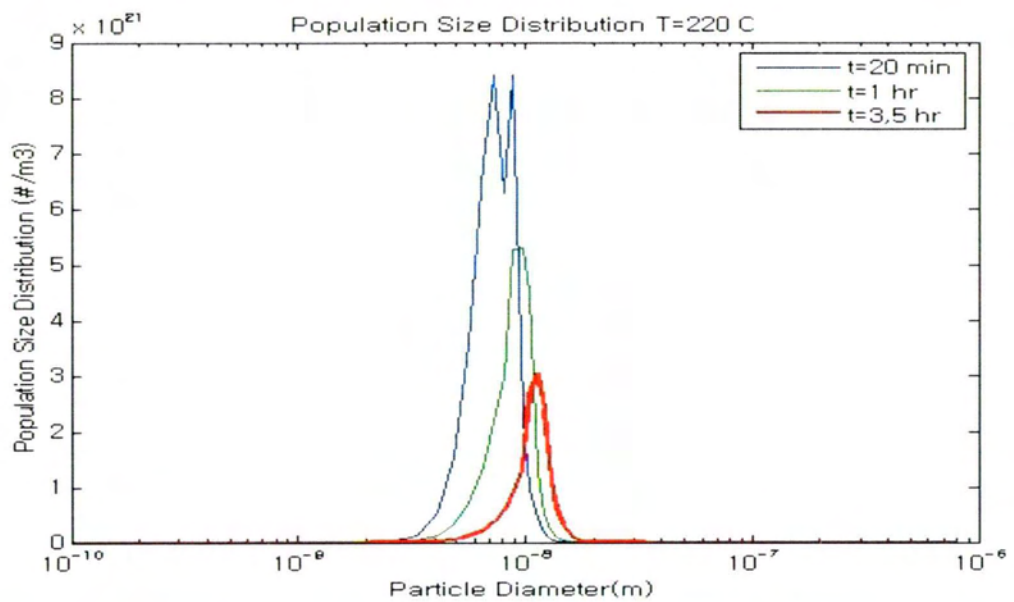


Figure 7: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του [κράματος 6082](#) για θερμοκρασία 220 C και για χρόνους t=20 min, 1hr, 3.5 hr

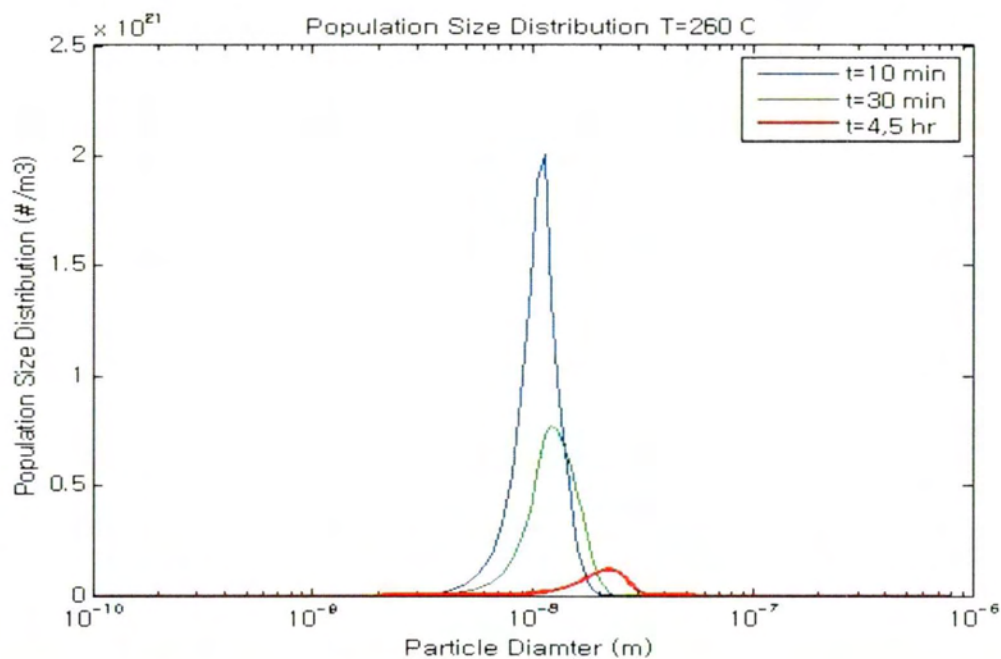


Figure 8: Κατανομή μεγέθους σωματιδίων του κράματος 6082 για θερμοκρασία 260 C και για χρόνους $t=10 \text{ min}$, 30 min , $4,5 \text{ hr}$

Στην συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του κατ'ογκον κλάσματος των σωματιδίων συνάρτηση του χρόνου για τα δυο κράματα (Εικόνες 8 & 9 αντίστοιχα), η μεταβολή της μέσης ακτίνας με τον χρόνο (εικόνες 10 & 11 για το 6061 και 6082 αντίστοιχα) και τέλος η μεταβολή της σκληρότητα κατά Vickers και των δυο κραμάτων με τον χρόνο (Εικόνες 12 & 13). Μπορεί να παρατηρηθεί η επίδραση της θερμοκρασίας στα κλάσμα όγκου των σωματιδίων (εικόνες 8&9), όπου και για τα δυο κράματα με μείωση της θερμοκρασίας ο χρόνος στον οποίο το κατ'ογκον κλάσμα προσεγγίζει την τιμή ισορροπίας αυξάνεται (κόκκινες καμπύλες) φτάνοντας όμως σε μια υψηλότερη τιμή λόγω αύξησης της παραπάνω τιμής ισορροπίας. Η διαφορά ωστόσο είναι σχετικά μικρή καθώς το κατ'ογκον κλάσμα είναι κυρίως ισχυρή συνάρτηση της σύστασης του μαγνησίου στο κράμα. Η μέση ακτίνα των σωματιδίων (εικόνα 10&11) μειώνεται με την μείωση της θερμοκρασίας γεγονός που οφείλεται στο ότι η κρίσιμη ακτίνα για πυρήνωση μειώνεται με την μείωση της θερμοκρασίας καθώς και με την αύξηση του υπερκορεσμού που εμφανίζεται σε χαμηλότερες θερμοκρασίες. Επίσης για υψηλές θερμοκρασίες και υψηλούς χρόνους η καμπύλη της ακτίνα προσεγγίζει την κλίση 1/3 που δίνεται από την θεωρία LSW. Τα αποτελέσματα της σκληρότητας (εικόνες 12,13) παρουσιάζουν την πλήρη πορεία του υλικού κατά την διεργασία της γήρανσης. Είναι εμφανές το κομμάτι της διεύρυνσης όπου η σκληρότητα πέφτει μετά από την μέγιστη τιμή της. Επίσης οι καμπύλες έχουν πολύ καλή σύγκλιση με τα πειραματικά

δεδομένα. Τέλος επιχειρείται μια σύγκριση μεταξύ των κραμάτων 6061 και 6082 για θερμοκρασία 200 C (εικόνες 14,15,16).

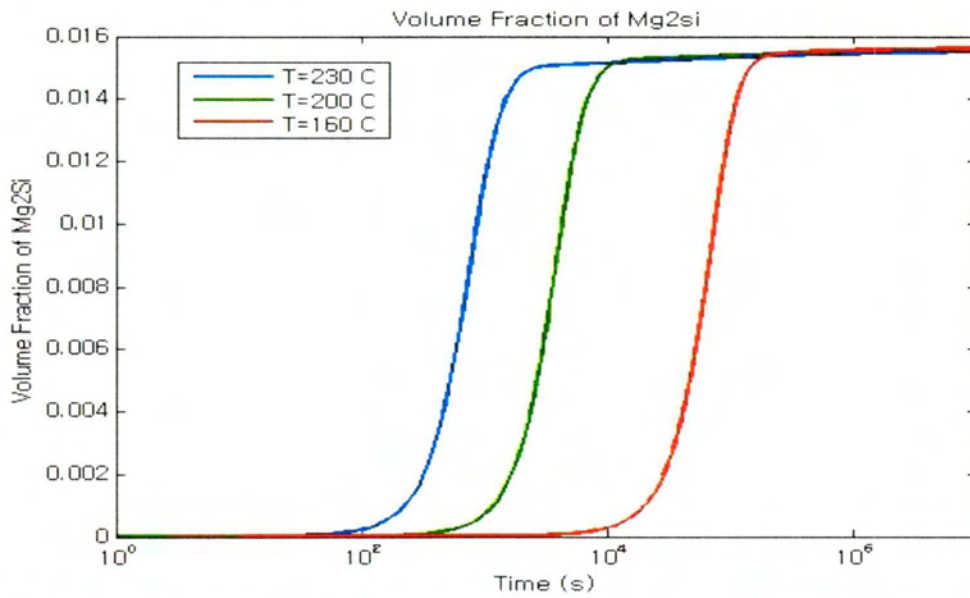


Figure 9: Μεταβολή του Κατ'όγκο κλάσματος της ένωσης Mg₂Si του κράματος 6061 με τον χρόνο για θερμοκρασίες T=230 C, T=200 C, T=160 C

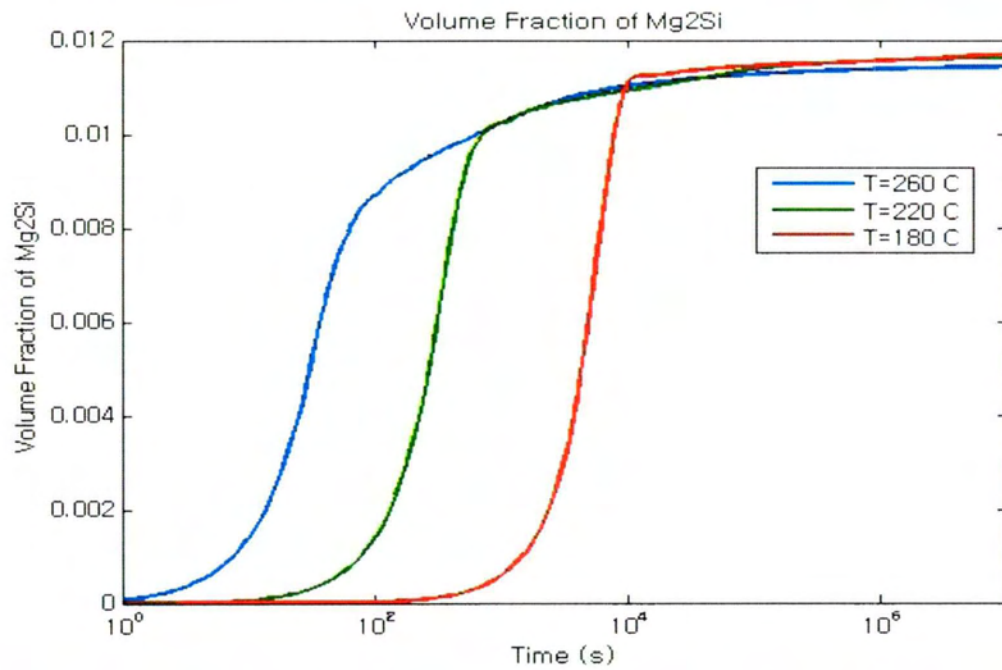


Figure 10: Μεταβολή του Κατ'όγκο κλάσματος της ένωσης Mg₂Si του κράματος 6082 με τον χρόνο για θερμοκρασίες T=260 C, T=220 C, T=180 C

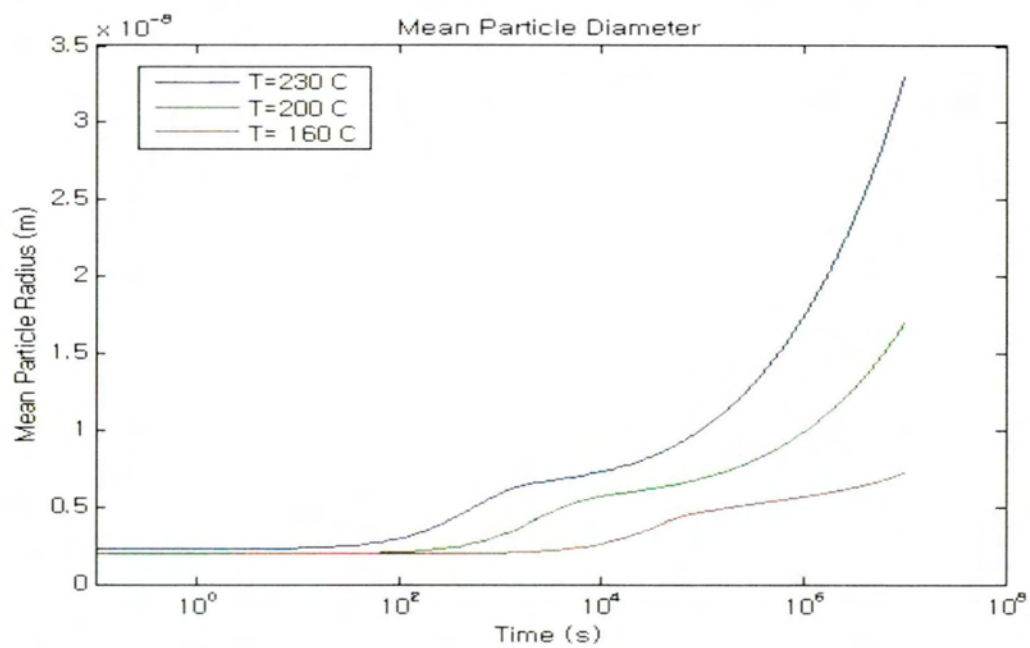


Figure 11: Μεταβολή της μέσης ακτίνας σωματιδίων ως προς τον χρόνο , του κράματος 6061 , για τρεις θερμοκρασίες $T=230, 200, 160\text{ C}$

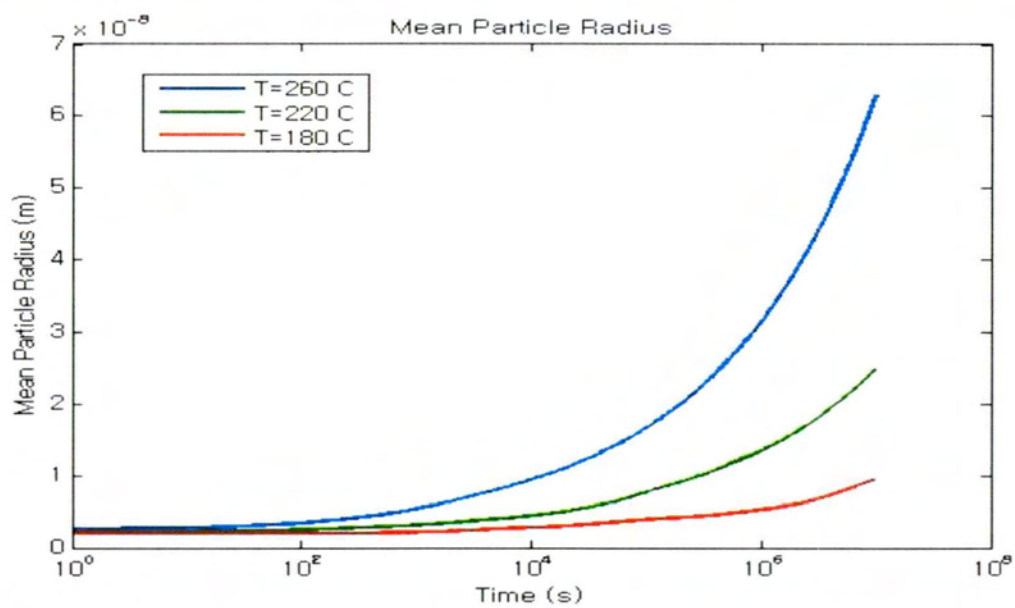


Figure 12: Μεταβολή της μέσης ακτίνας σωματιδίων ως προς τον χρόνο , του κράματος 6082 , για τρεις θερμοκρασίες $T=260, 220, 180\text{ C}$

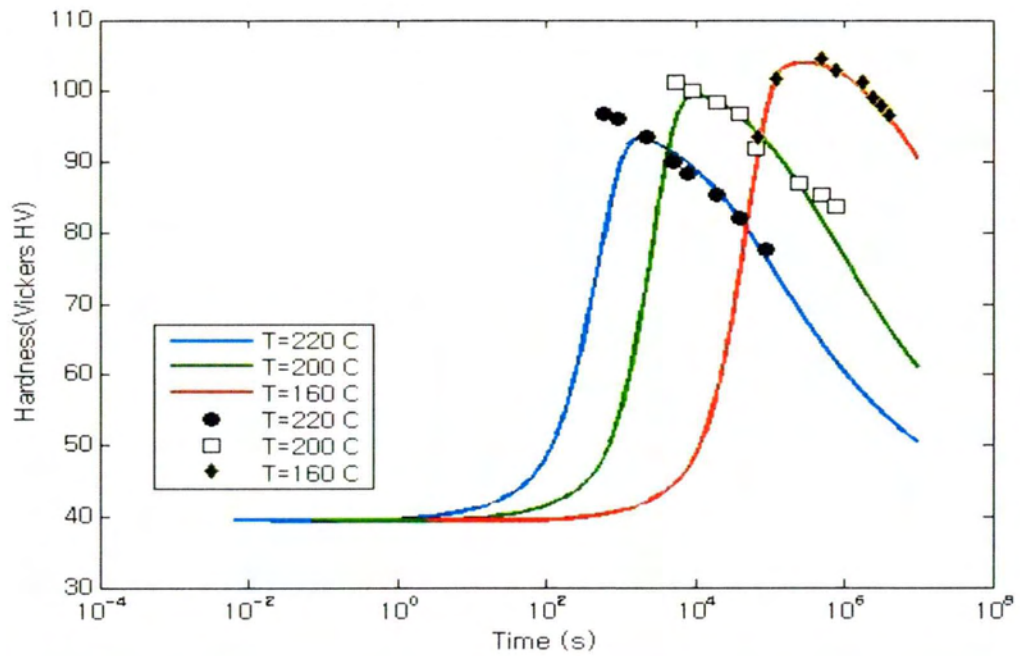


Figure 13: Μεταβολή της σκληρότητας με τον χρόνο για το κράμα 6061 και τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες

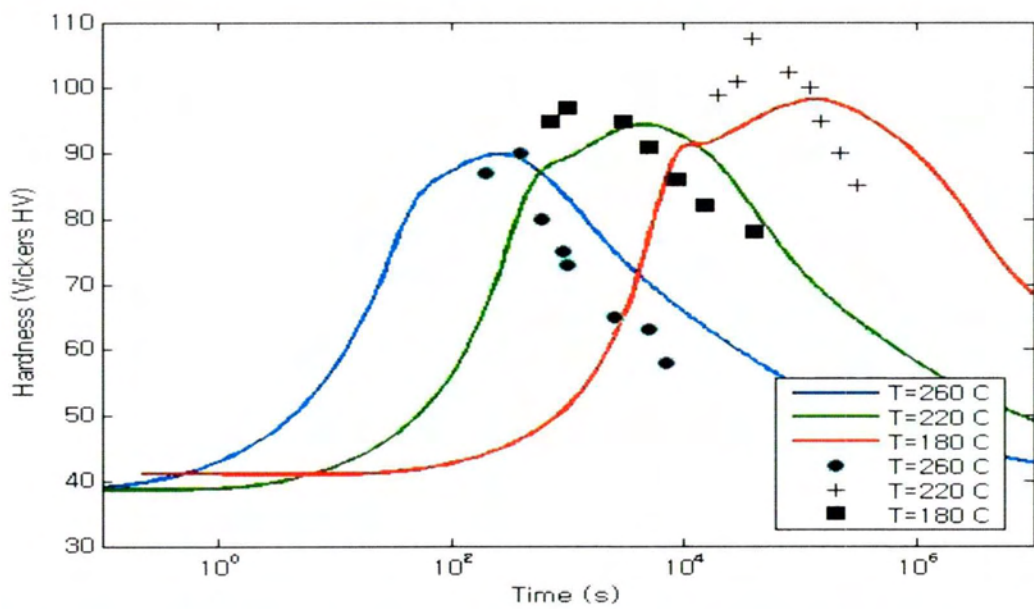


Figure 14: Μεταβολή της σκληρότητας με τον χρόνο για το κράμα 6082 και τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες

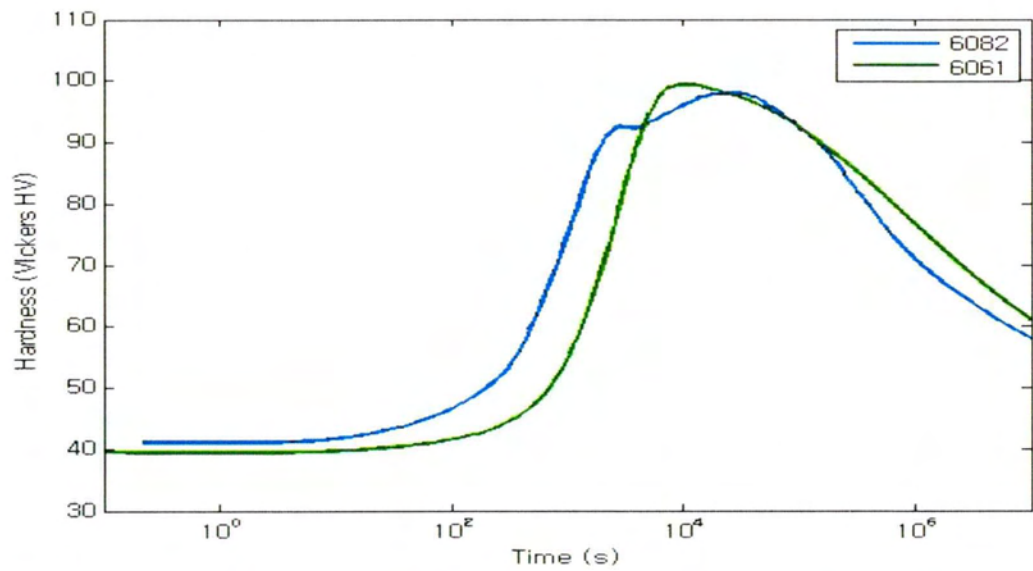


Figure 15: Σύγκριση καμπύλη γήρανσης κραμάτων 6061 και 6082 για θερμοκρασία T=200 C

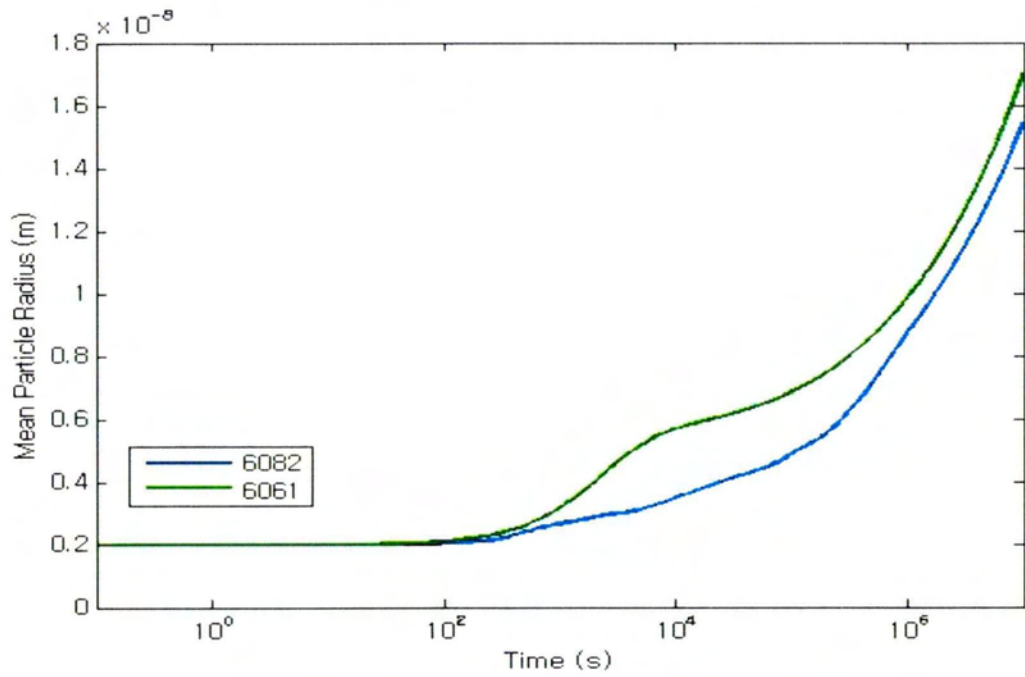


Figure 16: Σύγκριση μέσης ακτίνας σωματιδίων κραμάτων 6061 και 6082

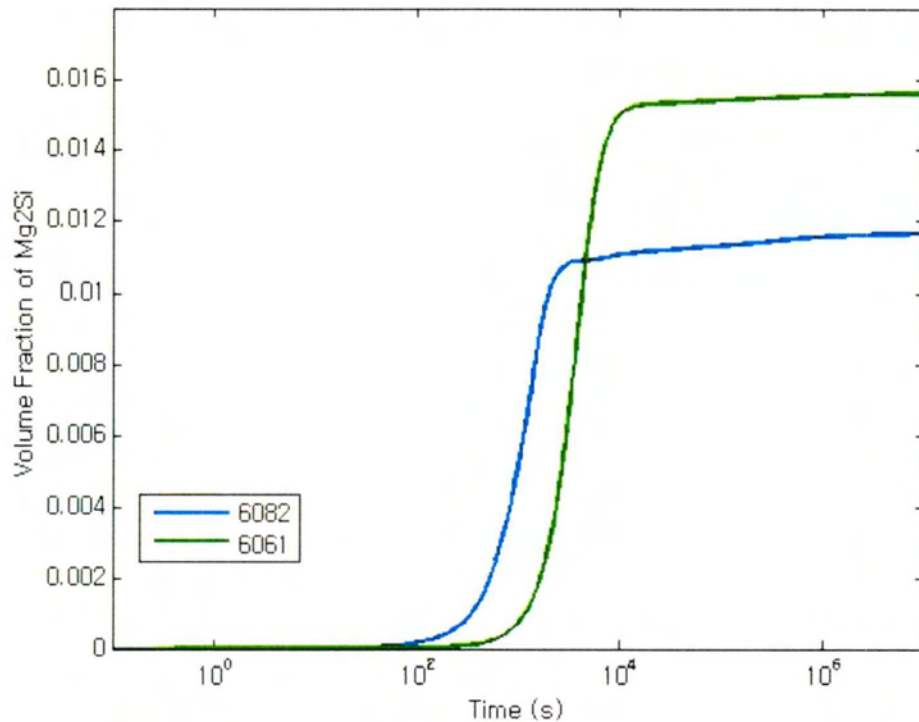


Figure 17: Σύγκριση κλάσματος όγκου σωματιδίων κραμάτων 6061 και 6082

Είναι εμφανές ότι το κράμα 6061 παρουσιάζει μεγαλύτερη μέγιστη σκληρότητα (εικόνα 14) παρόλο που το 6082 παρουσιάζει μια πιο λεπτή διασπορά σωματιδίων μικρότερης μέσης ακτίνας (εικόνα 15). Παράλυτα το κράμα 6061 περιέχει μεγαλύτερη ποσότητα μαγνησίου με αποτέλεσμα να κατέχει μεγαλύτερο κλάσμα όγκου από ότι το κράμα 6082 και να αναπληρώνει για την μεγαλύτερη μέση ακτίνα.

4.2 Μη ισόθερμες διεργασίες (συγκόλληση)

Στην συνέχεια το μοντέλο εφαρμόζεται στην κατεργασία της συγκόλλησης σύμφωνα με την μεθοδολογία που αναπτύχθηκε παραπάνω επιλέγονται 12 σημεία από την μια πλευρά της συγκόλλησης (θεωρώντας συμμετρία), μέσα στην Θερμικά επηρεασμένη ζώνη, και για καθένα από αυτά τα υπολογίζεται ένας θερμικός κύκλος (22) με μοντέλο μετάδοσης θερμότητας δίνοντας το αποτέλεσμα που φαίνεται στην εικόνα 18:

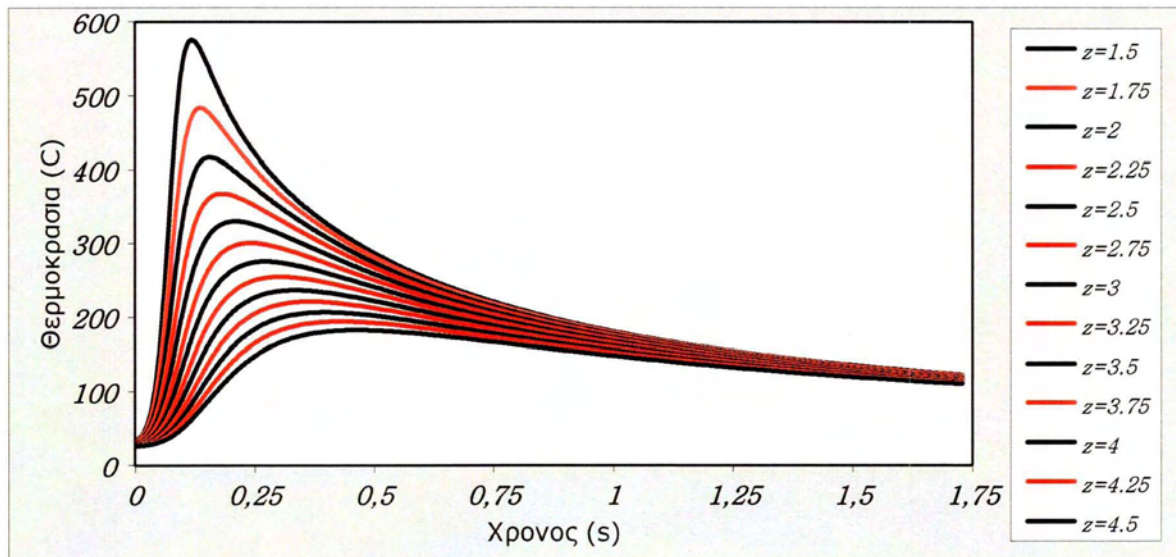


Figure 18: Θερμικός κύκλος και των 12 σημείων

Επίσης γίνεται σύγκριση των πειραματικών δεδομένων (εικόνα 19) που υπάρχουν στην βιβλιογραφία (22) με τα αποτελέσματα του μοντέλου. Για την προσομοίωση επιλέχθηκε κράμα αλουμινίου 6061 με αρχική κατεργασία γήρανσης στους 175 για 17.1 ώρες οδηγώντας σε μέγιστη σκληρότητα ίση με 104 HV

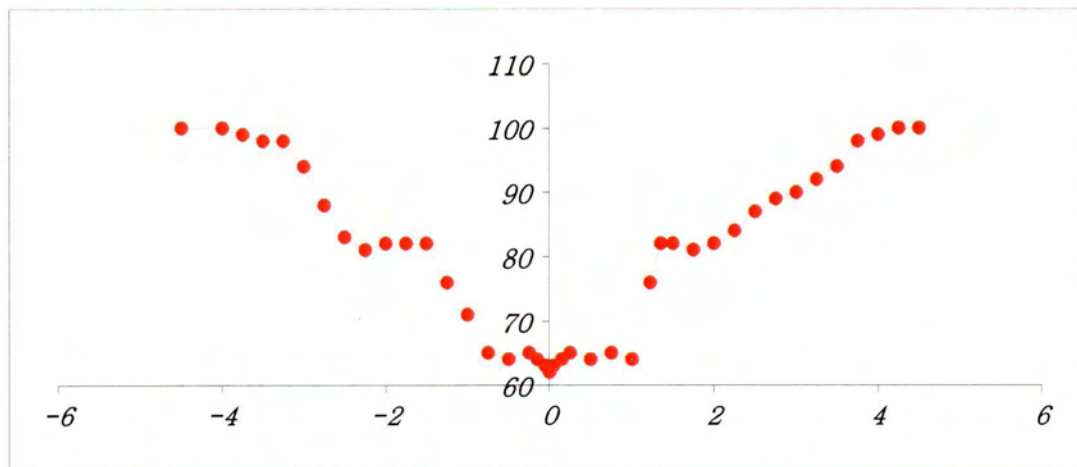


Figure 19 Πειραματικά δεδομένα σκληρότητας συγκόλλησης κράματος 6061

Παρακάτω εμφανίζονται τα στοιχεία της μικροδομη κατά μήκος της συγκόλλησης. Στην εικόνα 20 φαίνεται η μεταβολή της σκληρότητας κατά μήκος της συγκόλλησης. Τα αποτελέσματα συγκλίνουν με τα πειραματικά για όλα τα σημεία μετά τα 2mm. Αυτό συμβαίνει διότι το μοντέλο δεν συμπεριλαμβάνει την φυσική γήρανση η οποία στην συγκεκριμένη ζώνη της συγκόλλησης είναι υψηλή, γεγονός που αποδεικνύεται από τα σχήματα 22, 23 όπου φαίνεται το υψηλό ποσοστό διαλυτοποίησης. Το μοντέλο ωστόσο αδυνατεί να αντιμετωπίσει το γεγονός της διεύρυνσης των σωματιδίων στο δεύτερο μέρος της θερμοεπηρεασμένης ζώνης κάτι που γίνεται

εμφανές από την εικόνα 21 όπου η ακτίνα των σωματιδίων παραμένει σταθερή στο δεύτερο μέρος της ΘΕΖ.

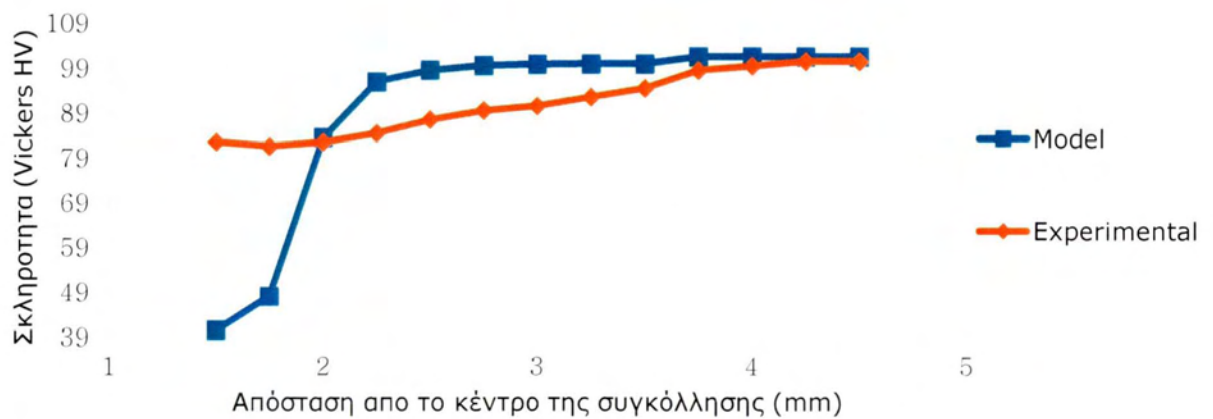


Figure 20 Σύγκριση Πειραματικών και υπολογιστικών τιμών σκληρότητας συγκόλλησης

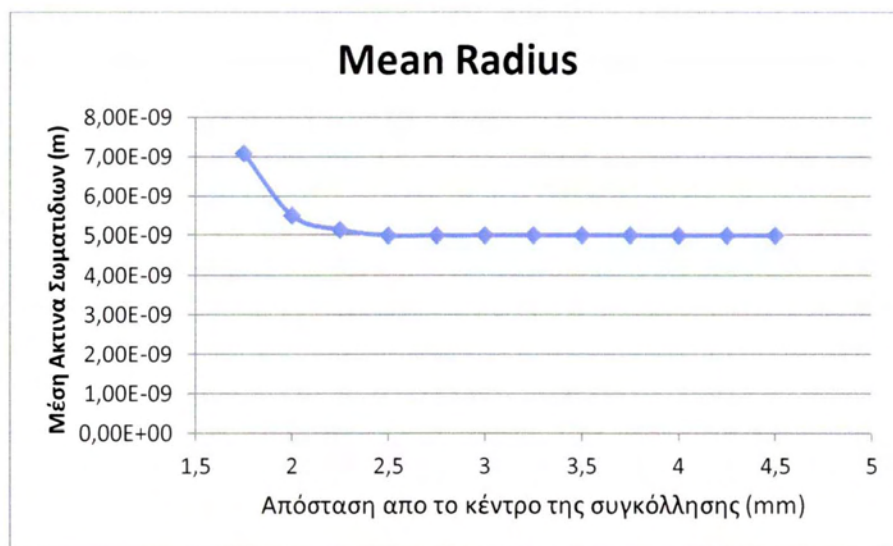


Figure 21 Μεταβολή μέσης ακτίνας σωματιδίων από το κέντρο της συγκόλλησης

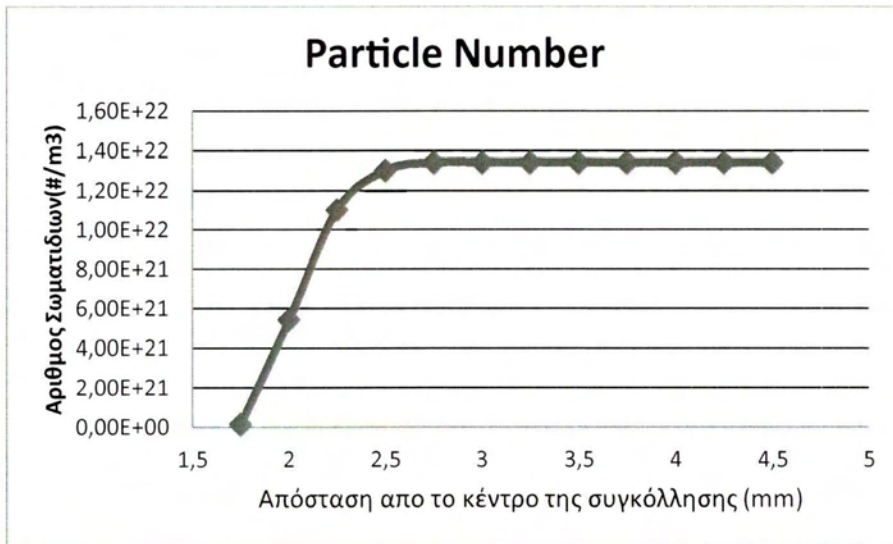


Figure 22 Μεταβολή αριθμού σωματιδίων από το κέντρο της συγκόλλησης

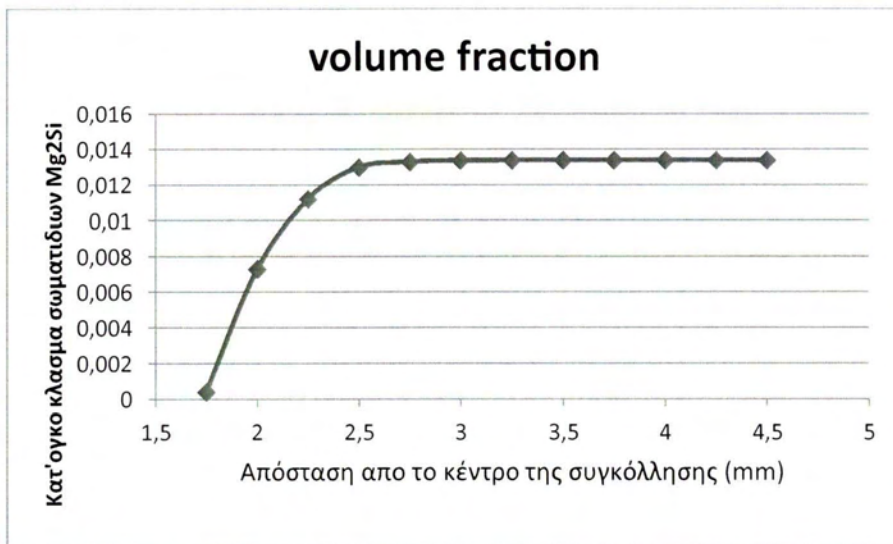


Figure 23 Μεταβολή κλάσμα όγκου με την απόσταση από το κέντρο της συγκόλλησης

4.3 Παρατηρήσεις

Παρατηρείται ότι το μοντέλο μετά τα 2mm από το κέντρο καταφέρει να προσεγγίσει την πειραματική καμπύλη. Ένας πιθανός λόγος για τον οποίο δεν μπορεί να συγκλίνει πριν από τα 2 mm είναι η φυσική γήρανση καθώς και η επανακαθίζηση μετά το περάς του θερμικού κύκλου. Το μοντέλο δεν λαμβάνει υπόψη την φυσική γήρανση και αποτυγχάνει να προβλέψει την τελική σκληρότητα του κράματος. Έχει παρατηρηθεί (10) ότι το μέγεθος της φυσικής γήρανσης στο πρώτο κομμάτι της θερμοεπηρεασμένη ζώνης μπορεί να φτάσει και τα 40 HV. Στην βιβλιογραφία υπάρχουν περιορισμένα μοντέλα για την διεργασία της φυσικής γήρανσης και η πλειοψηφία τους έχει αναπτυχθεί και προσαρμοστεί σε συγκολλήσεις τύπου FSW και μπορούν να οδηγήσουν σε λάθος συμπεράσματα αν χρησιμοποιηθούν για συμβατικές συγκολλήσεις. Τέλος υπάρχουν εμπειρικά μοντέλα (23) καθώς και κινητικά μοντέλα (24) τα οποία απαιτούν πειραματικά δεδομένα για την φυσική γήρανση μαζί με την θερμική ιστορία του υλικού η οποία επηρεάζει την φυσική γήρανση

5. Συμπεράσματα - Παρατηρήσεις

Σε αυτήν την εργασία αναπτύχθηκε και χρησιμοποιήθηκε ένα κινητικό μοντέλο παράλληλα με ένα μοντέλο ισχυροποίησης ώστε να γίνει πρόβλεψη της χρονικής μεταβολή της σκληρότητας κραμάτων αλουμινίου σε ισόθερμες και μη ισόθερμες διεργασίες. Αρχικά έγινε προσομοίωση της κατεργασίας της γήρανσης και φάνηκε ότι το μοντέλο μπορεί να προβλέψει με καλή ακρίβεια τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού. Τέλος Αυτό το μοντέλο εφαρμόστηκε στην κατεργασία της συγκόλλησης διακριτοποιώντας τον θερμικό κύκλο σε μια σειρά ισόθερων διεργασιών. Τα αποτελέσματα του μοντέλου ήταν ικανοποιητικά λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός ότι δεν συμπεριλαμβάνεται φυσική γήρανση στο μοντέλο. Ωστόσο παρουσιάστηκαν κάποιοι περιορισμοί στο μοντέλο που οι πιο βασικοί είναι οι εξής.

1. Το μοντέλο περιέχει πολλές ρυθμιζόμενες μεταβλητές οι οποίες απαιτούν πειραματικά δεδομένα και καλές προσεγγίσεις ώστε να μην επηρεάζουν το τελικό αποτέλεσμα. Πιο συγκεκριμένα η μεταβλητή των σημείων πυρήνωσης καθώς και ο ορός αναλογίας για την ισχυροποίηση με καθίζηση επηρεάζουν ανάλογα το αποτέλεσμα της προσομοίωσης δηλαδή για 10% μεταβολή στο N παρουσιάζεται 10% στην μέγιστη σκληρότητα του υλικού.
2. Το μοντέλο έχει ορισμένες παραδοχές που του μειώνουν την ευελιξία όπως η παραδοχή της μη υπερκάλυψης των διαχυτικών πεδίων η οποία περιορίζει το μοντέλο σε θερμοκρασίες κάτω των 170 C όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι σχετικά μικρός.
3. Το μοντέλο αν μπορεί να προβλέψει ικανοποιητικά την σκληρότητα στην ζώνη I της θερμοεπηρεασμένη ζώνης με αποτέλεσμα να μην δίνει καλή προσέγγιση του προφίλ της σκληρότητας στις συγκολλήσεις. Γεγονός που απαιτεί ενσωμάτωση ενός μοντέλου

φυσικής γήρανσης προσθέτοντας τουλάχιστον μια παραπάνω ρυθμιζόμενη μεταβλητή μειώνοντας ακόμη πιο πολύ την ευελιξία του μοντέλου.

6. Προτάσεις Για μελλοντική ερεύνα

Με την χρήση των παραπάνω υπολογιστικών τεχνικών είναι δυνατή η εκτίμηση της επίδρασης διαφόρων λειτουργικών παραμέτρων, κυρίως της θερμοκρασίας, στην μικροδομή του υλικού και η εύρεση των βέλτιστων τιμών για την επίτευξη των απαιτούμενων τελικών μηχανικών ιδιοτήτων του υλικού. Η παραπάνω διαδικασία είναι γενική και μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλα κραματικά συστήματα όπως Al-Cu, Al-Zn-Mg καθώς και σε θερμικές διεργασίες χαλύβων που περιλαμβάνουν καθίζηση καρβιδίων. Επίσης το μοντέλο μπορεί να εφαρμοστεί παράλληλα με ένα άλλο μοντέλο μετασχηματισμού φάσεων με απώτερο σκοπό τον υπολογισμό των τελικών μηχανικών ιδιοτήτων σε συγκολλήσεις FSW. Τέλος με μια διαδικασία βελτιστοποίησης των παραμέτρων του μοντέλου είναι δυνατόν να προσδιοριστεί η βέλτιστη σύσταση ή η εισαγωγή νέων κραματικών στοιχείων στο σύστημα γεγονός που μπορεί να οδηγήσει στον σχεδιασμό νέων κραμάτων. Απαραίτητη συνθήκη για να επιτευχθεί αυτό είναι να ενσωματωθούν στο μοντέλο η επίδραση όλων των κραματικών στοιχείων στην κινητική του μετασχηματισμού.

Βιβλιογραφία

1. **Slyozov, Lifshitz.** The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *J. Phys.Chem. Solids.* 1961, Τόμ. 19, σσ. 39-50.
2. **Schwartz, Langer J S and.** Kinetics of nucleation in near-critical fluids. *Phys. Rev.* 1980, Τόμ. 21, σσ. 945-58.
3. **R, Wagner R and Kampmann.** *Materials Science and Technology.* 1991, Τόμ. 5.
4. **Myhr O R, Grong O and Andersen S J.** Modelling of the age hardening behavior of Al–Mg–Si Alloys. *Acta Materialia.* 2001, 49, σσ. 65-75.
5. **R, Myhr O.** Modelling of the microstructure and strength evolution in Al–Mg–Si alloys during multistage thermal processing. *Acta MAterialia.* 2003.
6. **O, Myhr O R and Grong.** Modelling of non-isothermal transformations in alloys containing a particle distribution. *Acta Materialia.* 1990, 48, σσ. 1605-20.
7. **Robson, J.D.** A new model for prediction of dispersoid precipitation in aluminium alloys containing zirconium and scandium. *Acta Materialia.* 2004, 52, σσ. 1409-21.
8. **Prangnell, P Robson J D and.** Modelling Al₃Zr dispersoid precipitation in multicomponent aluminium alloys. *Mater. Sci. Eng.* 2003, Τόμ. A, 342, σσ. 240-50.
9. **Robson, J.D.** Modelling the overlap of nucleation, growth and coarsening during precipitation. *Acta Materialia.* 2004, 52, σσ. 4669-76.
10. **D. Carron, P. Bastid, Y. Yin, R.G. Faulkner.** Modelling of precipitation during friction stir welding of an Al-Mg-Si alloy. *TECHNISCHE MECHANIK (2010).* 30, σσ. 29- 44.
11. **M.F, Shercliff H.R Ashby.** A Process Model for Age Hardening of Aluminum Alloys. *Acta Metallurgica.* 1990, 38, σσ. 1789-1802.
12. **S, Hulburt H M and Katz.** Some problems in particle technology—a statistical mechanical formulation. *Chem. Eng. Sci.* 1964, Τόμ. 23, σσ. 68-86.
13. **D., RAMkrishna.** The status of polulation balances. *Reviews in chemical engineering.* 1985, 3, σσ. 49-95.

14. **Aaronson, I., Lee, K.** *Mechanisms of diffusional phase transformations in metals and Alloys.* s.l. : CRC Press.
15. **J, Crank.** *Mathematics of Diffusion.* s.l. : Oxford university Press, 2nd edition.
16. **S., Bennet M.K Rohani.** Solution of population balance equation with a new combined Lax-Wendroff/Crank-Nicolson Method. *Chemical Engineering Science.* 2001, 56, σσ. 6623-33.
17. **M.J., Nickmanis M Hounslow.** A finite element analysis of the steady state population balance equation for particulate systems: Aggregation and Growth. *Computers and Chemical Engineering.* 1996, 20, σσ. 261-266.
18. —. Finite element Method for steady state population balance equation. *AIChE journal.* 1998, 44, σσ. 2258-72.
19. **Hounslow M J, Ryall R L and Marshall V R.** A discretized population balance for nucleation, growth, and aggregation. *AIChE J.* 1988.
20. **W, Martin J.** *Precipitation Hardening.* s.l. : (Oxford: Butterworth-Heinemann), 1998. 2nd.
21. **Y, Deschamps A and Brechet.** Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-Mg alloy: II. Modeling of precipitation kinetics and yield stress. *Acta Materialia.* 1999, 47, σσ. 293-305.
22. **A.D. Zervaki, G.N. Haidemenopoulos, and S.G. Lambrakos.** Analysis of Heat Affected Zone in Welded Aluminum. *ASM International.* 2007.
23. **Feng, W. Woo H. Choo P. J. Withers Z.** Prediction of hardness minimum locations during natural aging. *Journal of material science.* 2099, 44, σσ. 6302-6309.
24. **GRONG, O. R. MYHR O.** PROCESS MODELLING APPLIED TO 6082-T6 ALUMINIUM. *Acta materialia.* 1991, Τόμ. 39, σσ. 2693-2702.
25. *Precipitation from Solid Solution.* **W.A., Anderson.** Metals Park, Ohio : ASME, 1959.

Appendix

Παρακάτω παρουσιάζονται οι κώδικες αριθμητικού υπολογισμού της κατανομής πληθυσμού των σωματιδίων για την περίπτωση της γήρανσης, γραμμική ψύξης και θέρμανσης καθώς και για την συγκόλληση. Σαν δεδομένα εισάγονται η ελάχιστη και η μεγίστη διάμετρος των σωματιδίων, ο χρόνος της διεργασίας, οι αρχικές συνθήκες καθώς και κάποιες επιλογές που δίνονται από το πρόγραμμα. Στην περίπτωση της μη ισόθερμης διεργασίας απαραίτητη είναι η εισαγωγή της συνάρτησης της θερμοκρασίας με τον χρόνο καθώς και ο αριθμός των σημείων διακριτοποίηση του θερμικού κύκλου. Το πρόγραμμα μετά την επίλυση παράγει την κατανομή σωματιδίων (**Y**) σε κάθε χρονικό σημείο ή το συνολική κατανομή του θερμικού κύκλου (**Full**). Η υπορουτίνα χρησιμοποιεί πρόγραμμα επίλυσης με μεταβαλλόμενο βήμα, ώστε να επιτύχει σύγκλιση, όποτε το διάνυσμα των σημείων του χρόνου (**TT**) καθορίζεται από το πρόγραμμα όμως τα όρια του παραμένουν αυτά που εισήγαγε ο χρήστης στο διάνυσμα του χρόνου (**Tspan**). Ακόμα και στην περίπτωση της διακριτοποίηση του θερμικού κύκλου όπου εισάγεται η χρονική διακριτοποίηση, το πρόγραμμα σε κάθε σημείο ισορροπίας μπορεί να εκτελέσει πολλαπλά βήματα ώστε να επιτύχει σύγκλιση και τελικά παράγει το συνολικό διάνυσμα του χρόνου (**Fullt**). Ο ρυθμός πυρήνωσης και ανάπτυξης καθώς και η δημιουργία των εξισώσεων πραγματοποιούνται στην υπορουτίνα (**rhs**) Τέλος σε συνδυασμό με τις άλλες υπορουτίνες υπολογίζονται τα παρακάτω: μέση σύσταση Mg στην μήτρα (**cbb**), κατ'ογκον κλάσμα σωματιδίων η αλλιώς η ροπή τρίτης τάξης (**m3**), ο συνολικός αριθμός σωματιδίων (**nb**), η μέση ακτίνα σωματιδίων (**rb**) και η σκληρότητα σε Vickers (**sp**).

Πρόγραμμα ισόθερμης διεργασίας

%Isothermal M-File

% M-File Calculating the Population Size distribution in
%Isothermal Conditions

```
global n0 Z kb cp DG0 D c0 a T k h ceq di ci gamma Vm R;
```

```
n0=3e+19; % Nucleation sites  
Z=0.05; % Zeldovich number  
a=4.04e-10;% atomic radius  
R=8.314; % Gas constant  
kb=1.38e-23; %Boltzman constant  
Vm=3.84e-05; % mollar volume  
D0=2.2e-4; %Diffusion constant  
gamma=0.5; %interfacial energy  
Q0=130000; %Critical diffusion energy  
%Ni=6e+21;  
DG0=4.04e-19; %Exponential term in Nucleation Rate  
QS=47175; %Solvus energy
```



```

cp=0.634; %magnesium concentration in Mg2Si
c0=0.01;%Initial concentration
cs=970; %Equilibrium constant

% Initial and final diameter
ds=1e-10;
df=8000e-10;
% Number of Classes
k=1000;
%Temperature
T=160+273.15;
%vector for "Non-negative" option
p=[1:1:1000];
p=p';
% Discretization Step
h=(df-ds)/k;
% Diameter Vector
di=1:1:k;
ci=1:1:k;
for ii=1:k
    di (ii)=ds+((ii-1)*h);
end
% Diffusion coefficient
D=D0*exp (-Q0/(R*T));
% Solid Solubility
ceq=0.01*cs*exp (-QS/(R*T));
% Gibbs-Thomson equation
for ii=1:k
    ci (ii)=ceq*exp (2*gamma*Vm/(R*T.*di (ii)*0.5));
end

%Initial conditions

for ii=1:k
    nii (ii)=0;
end

options=odeset
('NormControl','on','MaxStep',1000,'BDF','on','MaxOrder',5,'stats
','on','NonNegative',p);

% Norm control =>Error control
% Max step=> Maximum step during solution
% BDF or NDF=>Backward or numerical differentiation formulas
% Maxorder=> Order of solution/accuracy(1-5)
% Non negative=>not negative solution

Y=0;
%Ageing Time
Tspan=[0 1e+7];
%Numerical solution

```

```
[TT,Y]=ode15s (@rhs,Tspan,nii,options);
Y=Y';
```

```
[cbb,m3]=mof(TT,Y);
[nb,rb,sp]=yield1(TT,Y,m3);
```

Πρόγραμμα υπολογισμού σε μη ισόθερμες διεργασίες (συγκόλληση)

```
% M-File For Non-isothermal process (welding)
%
global n0 Z kb cp DG0 D c0 a T k h ceq di ci gamma Vm R cs QS ;

n0=3e+19; % Nucleation sites
R=8.314; %Universal gas constant
Z=0.05; % Zeldovich number
a=4.04e-10;% atomic radius R=8.314; % Gas constant
kb=1.38e-23; %Boltzman constant
Vm=3.84e-05; % mollar volume
D0=2.2e-4; %Diffusion constant
gamma=0.5; %interfacial energy
Q0=130000; %Critical diffusion Energy
DG0=4.04e-19;
QS=47175; %Solvus Energy
cp=0.634; %magnesium concentration in Mg2Si
c0=0.009;%Initial concentration
cs=970;
% Initial and final diameter
ds=1e-10;
df=8000e-10;
% Number of Classes
k=1000;
tlt=0;
%Temperature
T=175+273.15;
%Vector for "Non-Negative" option
p=[1:1:1000];
p=p';
% Discretaziation Step
h=(df-ds)/k;
% Diameter Vector
di=1:1:k;
ci=1:1:k;

for ii=1:k
di (ii)=ds+((ii-1)*h);
end
% Diffusion coefficient
D=D0*exp (-Q0/(R*T));
% Solid Solubility
ceq=0.01*cs*exp (-QS/(R*T));
```

```

% Gibbs-Thommsen equation
for ii=1:k
ci (ii)=ceq*exp (2*gamma*Vm/(R*T.*di (ii)*0.5));
end
%Initial Conditions
for ii=1:k
nii (ii)=0;
end
Y=0;

options=odeset
('NormControl','on','MaxStep',100,'BDF','off','MaxOrder',4,'stats
','on','NonNegative',p);

% Norm control =>Error control
% Max step=> Maximum step during solution
% BDF or NDF=>Backward or numerical differentiation formulas
% Maxorder=> Order of solution/accuracy(1-5)
% Non negative=>not negative solution

% initial thermal process before the welding
Tspan=[0 63360];
TT=Tspan;
[TT,Y]=ode15s (@rhs,Tspan,nii,options);

% cooling loop

ti=length(time);

Y=Y'; % Transpose the initial Y
tic
for i=1:ti

%Temperature distribution
T=z175(i);

tl=length(TT);

for ii=1:k
nii (ii)=Y (ii,tl);
end
if i<ti
Tspan=[time(i) time(i+1)];
else
Tspan=[time(ti) time(ti)+0.00001];
end

% Diffusion coefficient

```

```

D=D0*exp (-Q0/(R*T));
% Solid Solubility
ceq=0.01*cs*exp (-QS/(R*T));
% Gibbs-Thommsen equation
for ii=1:k
ci (ii)=ceq*exp (2*gamma*Vm/(R*T.*di (ii)*0.5));
end

% Numerical method function
[TT,Y]=ode15s (@rhs,Tspan,nii,options);
tl=length (TT);
Y=Y';

%Creating the Full matrix of Psd and time
%for the whole thermal cycle
for ik=1:tl
    for ikk=1:1000
Full (ikk,ik+tlt)=Y (ikk,ik);
    end
    Fullt (ik+tlt)=TT (ik);
end
tlt=tlt+tl;
end
%All cells smaller than 1(no physical meaning are set equal to
zero)
for ik=1:tlt
    for ikk=1:1000
        if Full (ikk,ik)<1
Full (ikk,ik)=0;
        else
            end
        end
    end
end

[cbb,m3]=mof (Fullt,Full);
[nb,rb,sp]=yield1 (Fullt,Full,m3);
Toc

```

Υπορουτίνα υπολογισμού Πυρήνωσης, ρυθμού ανάπτυξης και δημιουργίας εξίσωσης πληθυσμιακού ισοζυγίου.

```
% Rhs m-file
```

```
function [dn_dt] = rhs(t,n)
global n0 Z kb c0 cp DGO D a T k h ceq di ci gamma Vm R;

for i=1:k
    ec(i)=0;
end

for i=1:k
    fp(i)=(di(i).^3).*abs(n(i));
end

f=(pi/6)*(sum(fp)); %volume fraction
t
cb=(c0-f*cp)/(1-f); %Matrix Concentration

%Growth Rate
for m=1:k
    G(m)=((cb-ci(m))/(cp-ci(m)))*D/((0.5)*di(m));
end

if ceq<c0 && cb>ceq %Conditions for dissolution

%Critical Radius

rc=((2*gamma*Vm)/(R*T))*(1/(log(cb/ceq)));

%Nucleation parameters
DGS=DGO/((log(cb/ceq))^2);
beta=(4*pi*(rc^2)*D*c0)/(a^4);
tau=1/(2*beta*(Z^2));

%Class of critical radius
for mm=1:k
    ee(mm)=2*rc-di(mm);
    if ee(mm)>0
```

```

        count=0;
    else
        count=mm+1;
        break
    end
end

if count==0 %Condition to avoid errors and negative rc
    S=0;
else
    ec(count)=1;
    %Nucleation Rate
    S=n0*Z*beta*(exp(-DGS/(kb*T)))*exp(-tau/t);
end

else
    S=0;
end

%Right Hand Side of the equation'

for ii=2:k-1
    if G(ii)>0
        %Border Equations
        dn_dt(1)=- (n(1)/h).*G(1);
        dn_dt(k)=(- (n(k)/h).*G(k)) + ((n(k-1)/h).*G(k-1)) +(ec(k)*S);
        %inside Equations
        dn_dt(ii)=(- (n(ii)/h).*G(ii)) + ((n(ii-1)/h).*G(ii-1))
        +(ec(ii)*S) ;

    else
        %Border Equations
        dn_dt(1)=(- (n(2)/h).*G(2)) + ((n(2)/h).*G(2)) ;
        dn_dt(k)=((n(k)/h).*G(k)) +(ec(k)*S) ;
        %Inside Equations
        dn_dt(ii)=(- (n(ii+1)/h).*G(ii+1)) + ((n(ii)/h).*G(ii))

    end
end
dn_dt=dn_dt';

```

Υπορουτίνα υπολογισμού μέσης σύστασης στην μήτρα και κατ'ογκο κλάσμα

%Volume fraction and mean concentration in Matrix

```
function [cbb,mf]=mof(t,n)
```

```
global k di c0 cp;
```

```
max=length(t);
```

```

for j=1:max
    for i=1:k

        ff(i,j)=(di(i).^3).*n(i,j);
    end
end
for j=1:max
mf(j)=(pi/6)*sum(ff(:,j));
end

for jj=1:max

    cbb(jj)=(c0-(mf(jj)*cp))/(1-mf(jj));
end

```

Υπορουτίνα υπολογισμού συνολικού αριθμού σωματιδίων, μέσης ακτίνας και σκληρότητας.

```

%Strenght Model M-File

function [nb,rb,sp]=yield1(t,n,m3)
global k cp c0 di;

ksi=66.3;
kmg=29;
%
s0=70; % Mpa
ri=0.5.*di;
%precipitation hardening constant
kpp=9e-6;
%Critical shear radius
rc=5e-9;
max=length(t);
c0si=0.008; %
for j=1:max
nb(j)=sum(n(:,j));
rb(j)=0.5*((m3(j)/nb(j)).^(1/3));
end

for j=1:max
    for i=1:k
        if ri(i)<rc
            F(i)=ri(i)/rc;
        else
            F(i)=1;
        end
    end
end

```

```

        Fb(j)=sum(n(:,j).*F(:))/sum(n(:,j));
end

for j=1:max
    %Precipitation hardening in Mpa
    spp(j)=kpp*(sqrt((m3(j))/rb(j)))*(Fb(j).^1.5);

    %Solid solution Hardening in Mpa
    spss(j)=(kmg*(c0-(m3(j)*cp))/(1-(m3(j)))) + (ksi*(c0si-(m3(j)*(1-
cp)))/(1-(m3(j))));
end

% Total hardness In Vickers
sp=(s0+spp+spss)*0.33)+16;

```




ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



004000049019