

Određivanje konstitutivnog ponašanja mikrokonstituenata sinteriranog čelika

Dobrić, Danilo

Master's thesis / Diplomski rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:404393>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-11**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Danilo Dobrić

Zagreb, 2024.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

DIPLOMSKI RAD

Mentori:

Izv. prof. dr. sc. Tomislav Lesičar

Dr. sc. Ante Jurčević, mag. ing. mech.

Student:

Danilo Dobrić

Zagreb, 2024.

Izjavljujem da sam ovaj rad izradio samostalno koristeći znanja stečena tijekom studija i navedenu literaturu.

Želio bih zahvaliti mentorima izv. prof. dr. sc. Tomislavu Lesičaru i dr. sc. Anti Jurčeviću na učestaloj komunikaciji i pomoći u radu.

Zahvalan sam ovom fakultetu na svemu što me je naučio. Zahvalan sam svim ljudima koje sam upoznao i s kojima sam se imao priliku družiti pohađajući ga.

Danilo Dobrić



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE



Središnje povjerenstvo za završne i diplomske ispite
Povjerenstvo za diplomske ispite studija strojarstva za smjerove:

Procesno-energetski, konstrukcijski, inženjersko modeliranje i računalne simulacije i brodstrojarski

Sveučilište u Zagrebu Fakultet strojarstva i brodogradnje	
Datum	Prilog
Klasa: 602 - 04 / 24 - 06 / 1	
Ur.broj: 15 - 24 -	

DIPLOMSKI ZADATAK

Student: **Danilo Dobrić**

JMBAG: 0035219451

Naslov rada na hrvatskom jeziku: **Određivanje konstitutivnog ponašanja mikrokonstituenata sinteriranog čelika**

Naslov rada na engleskom jeziku: **Determination of Constitutive Behaviour of Sintered Steel Microconstituents**

Opis zadatka:

Metalurgija praha u usporedbi s klasičnom metalurgijom omogućuje niže troškove proizvodnje i manje onečišćenje okoliša, zbog čega postaje sve popularnija u industriji. Jedan od učestalih materijala dobiven metalurgijom praha je sinterirani čelik. Mikrostruktura sinteriranog čelika se sastoji od feritnih i bainitnih zrna te pora. Kako bi se u numeričkim simulacijama postiglo realnije opisivanje ponašanja komponenti izrađenih od sinteriranog čelika, nužna je upotreba višerazinskih metoda i računalne homogenizacije. U ovom diplomskom radu razmatrat će se sinterirani čelik Astaloy Mo+0,2C gustoće $7,1 \text{ g/cm}^3$, za koji su provedena ispitivanja na mikrostrukturnoj razini i makrorazini.

Potrebno je:

1. Proučiti literaturu vezanu uz numeričko modeliranje konstitutivnog ponašanja materijala i računalnu homogenizaciju.
2. Na temelju metalografskih snimaka mikrostrukture kreirati numerički model reprezentativnog volumenskog elementa.
3. Odrediti parametre konstitutivnog ponašanja konstituenata mikrostrukture razmatranog sinteriranog čelika. Točnost dobivenih parametara validirati primjenom računalne homogenizacije prvog reda te usporedbom dobivenih numeričkih rezultata s makroskopskim eksperimentalnim mjerenjima.

Za provedbu numeričkih simulacija primijeniti komercijalni programski paket Abaqus. U radu je potrebno navesti korištenu literaturu i eventualno dobivenu pomoć.

Zadatak zadan:

Datum predaje rada:

Predviđeni datumi obrane:

26. rujna 2024.

28. studeni 2024.

5., 6. i 9.12.2024.

Zadatak zadao:

Predsjednik Povjerenstva:

Izv. prof. dr. sc. Tomislav Lesičar

Prof. dr. sc. Tanja Jurčević Lulić

Dr. sc. Ante Jurčević, mag. ing. mech.

Sadržaj

Sadržaj	I
Popis slika	III
Popis tablica	IV
Popis oznaka	V
Sažetak	VII
Summary	VIII
1. Uvod	1
2. Mikrostruktura materijala	3
3. Metalurgija praha	6
3.1 Proizvodnja metalnog praha	6
3.2 Kompaktiranje i sinteriranje	8
3.3 Prednosti i mane proizvoda dobivenih metalurgijom praha	10
4. Podrijetlo eksperimentalnih podataka	11
4.1 Makroskopski jednoosni vlačni test	11
4.2 Instrumentirana indentacija	13
5. Višerazinsko modeliranje materijala	16
5.1 Višerazinske metode	16
5.2 Računalna homogenizacija	18
6. Određivanje mehaničkih karakteristika materijalnih faza	22
6.1 Reprezentativni volumenski element	22
6.2 Ispitivanje osjetljivosti mreže konačnih elemenata	23
6.3 Permutacija materijalnih parametara	32
6.4 Homogenizacija metalne matrice	33
7. Zaključak	40

Literatura

43

Popis slika

1	Fe-C fazni dijagram [4]	3
2	Karakteristična heterogena mikrostruktura čelika [6]	4
3	Proizvodnja metalnog praha procesom atomizacije, [8]	6
4	Centrifugalna tehnika proizvodnje metalnog praha, [9]	7
5	Atomizacija vodenim sprejem, [9]	7
6	Sinterirane čestice bronce, $d = 26\mu\text{m}$ [11]	8
7	Rast veza i smanjenje pora u procesu sinteriranja [11]	9
8	Mikrostruktura sinteriranog čelika Astaloy Mo+0,2C	10
9	Ispitni uzorci pripremljeni za jednoosni vlačni test [13]	11
10	Rastezanje epruvete uz pomoć kidalice	12
11	Makroskopske krivulje naprezanje-deformacija	14
12	Krivulje indentacije za različite čestice [15]	14
13	Shema konkurentnih višerazinskih metoda [17]	17
14	Računalna homogenizacija [20]	19
15	Usporedba simulacije i eksperimenta [12]	22
16	Prvi RVE	24
17	Drugi RVE	24
18	Treći RVE	25
19	Četvrti RVE	25
20	Osnovni pravokutni konačni element [22]	26
21	Periodični rubni uvjeti	28
22	Osjetljivost prvog RVE-a	30
23	Osjetljivost drugog RVE-a	30
24	Osjetljivost trećeg RVE-a	31
25	Osjetljivost četvrtog RVE-a	31
26	Usporedba makroskopskih podataka i RVE analize	33
27	Numerička aproksimacija makro-krivulje	37

Popis tablica

1	Mehaničke karakteristike sinteriranog čelika	13
2	Elastični i elastoplastični parametri mikrokonstituenata	15
3	Broj KE za različite gustoće mreže	27
4	Makroskopski eksperimentalni podaci	34

Popis oznaka

Oznaka	Jedinica	Opis
A	mm^2	površina
A^i	mm^2	površina i -tog konačnog elementa
A_0	mm^2	početna površina poprečnog presjeka epruvete
a_k	-	koeficijent k -tog člana polinoma
C_{ijkl}	MPa	tenzor elastičnosti
\bar{C}_{ijkl}	MPa	homogenizirani tenzor elastičnosti
D_{ijkl}^{ep}	MPa	elastoplastični tenzor krutosti
E	MPa	modul elastičnosti
\bar{E}	MPa	homogenizirani modul elastičnosti
E_i	MPa	mikroskopski modul elastičnosti homogene metalne matrice
\bar{E}_i	MPa	makroskopski modul elastičnosti homogene metalne matrice
F	N	sila rastezanja epruvete
\mathbf{F}	-	tenzor gradijenta deformiranja
\mathbf{F}_M	-	makroskopski tenzor gradijenta deformiranja
f	-	općenita funkcija triju varijabli
J	-	Jacobijeva determinanta
K	MPa	modul očvršćenja
\mathbf{K}	N/mm	globalna matrica krutosti
n	-	parametar očvršćenja
\bar{n}	-	parametar očvršćenja n homogene metalne matrice na makrorazini
n_{el}	-	broj konačnih elemenata
\mathbf{P}_M	N	prvi Piola-Kirchhoffov tenzor naprežanja na makrorazini
p	-	aproksimacijski polinom
\mathbf{R}	N	globalni vektor čvornih sila
u	mm	pomak u smjeru osi x
u_i	mm	vektor pomaka u smjeru osi x
v_i	mm	vektor pomaka u smjeru osi y
\mathbf{w}	mm	vektor mikrofluktucija
\mathbf{X}	mm	vektor položaja u referentnoj konfiguraciji
\mathbf{x}	mm	vektor položaja u trenutnoj konfiguraciji

Oznaka	Jedinica	Opis
α	-	parametar očvršćenja
$\bar{\alpha}$	-	parametar očvršćenja α homogene metalne matrice na makrorazini
ε	-	deformacija
ε_x	-	deformacija u smjeru osi x
$\bar{\varepsilon}_x$	-	homogenizirana deformacija u smjeru osi x
ε_{ij}	-	tenzor malih deformacija
ε_{ij}^e	-	elastični dio tenzora malih deformacija
ε_{ij}^p	-	plastični dio tenzora malih deformacija
$\bar{\varepsilon}_{ij}$	-	homogenizirani tenzor malih deformacija
σ	MPa	naprezanje
σ_x	MPa	naprezanje u smjeru osi x
$\bar{\sigma}_x$	MPa	homogenizirano naprezanje u smjeru osi x
σ_y^0	MPa	granica tečenja
$\bar{\sigma}_{y0}$	MPa	makroskopska granica tečenja homogene metalne matrice
σ_{ij}	MPa	Cauchyjev tenzor naprezanja
$\bar{\sigma}_{ij}$	MPa	homogenizirani Cauchyjev tenzor naprezanja

Sažetak

Sinterirani čelik popularan je materijal sa širokim područjem primjene u industriji. Mikrostruktura sinteriranog čelika je porozna, što za posljedicu ima opasnost od koncentracije napreznja na mikrorazini i nepredviđenog pucanja. Višerazinske metode prikladan su alat za analizu problema kod kojih je bitno modelirati materijal na mikro- i makrorazini. Koristeći jednu vrstu višerazinske metode, to jest računalnu homogenizaciju prvog reda, proveden je niz proračuna na reprezentativnim elementima mikrostrukture sinteriranog čelika Astaloy Mo+0,2C. Proračuni su provedeni uzimajući u obzir sve moguće kombinacije materijalnih parametara mikrokonstituenta (ferita i bainita) dobivenih instrumentiranom indentacijom u doktorskoj disertaciji dr. sc. Zorana Tomića, gdje se numerički proračun nije podudaraao s makrorazinskim eksperimentom. Podaci dobiveni numeričkom simulacijom u ovom radu uspoređivani su s rezultatima jednoosnog vlačnog testa u spomenutoj disertaciji. Ponovno veliko odstupanje numeričke simulacije na mikrorazini od eksperimenta na makrorazini ukazuje na nepreciznost metode determinacije mehaničkih svojstava mikrokonstituenta ili upitnu valjanost pretpostavki i pojednostavljenja uključenih u računalni model.

Ključne riječi: sinterirani čelik, mikrostruktura, računalna homogenizacija, reprezentativni volumenski element

Summary

Sintered steel is a popular material with a wide range of industrial applications. The porosity of sintered steel microstructure makes it susceptible to micro-level stress concentration and unanticipated cracking. Multiscale methods are a useful modeling tool in situations when it is important to take both the microscale and the macroscale mechanical behaviour into account. Using one type of multiscale methods, i.e. first-order computational homogenization, multiple analyses were carried out using representative microstructural elements of Astaloy Mo+0.2C sintered steel. The simulations were carried out by evaluating all possible combinations of material parameters of microconstituents (ferrite and bainite) obtained by instrumented indentation in the doctoral dissertation of Zoran Tomić, PhD, in which the numerical analysis did not match the macroscale experiment. The data obtained by numerical simulation in this paper were compared with results of the uniaxial tensile test in the aforementioned dissertation. A recurrent large deviation of the numerical analyses at the micro-level from the experiment at the macro-level indicates either the invalidity of the method for determination of microconstituents' mechanical properties or the questionable validity of the assumptions and simplifications constituting the computational model.

Key words: sintered steel, microstructure, computational homogenization, representative volume element

1. Uvod

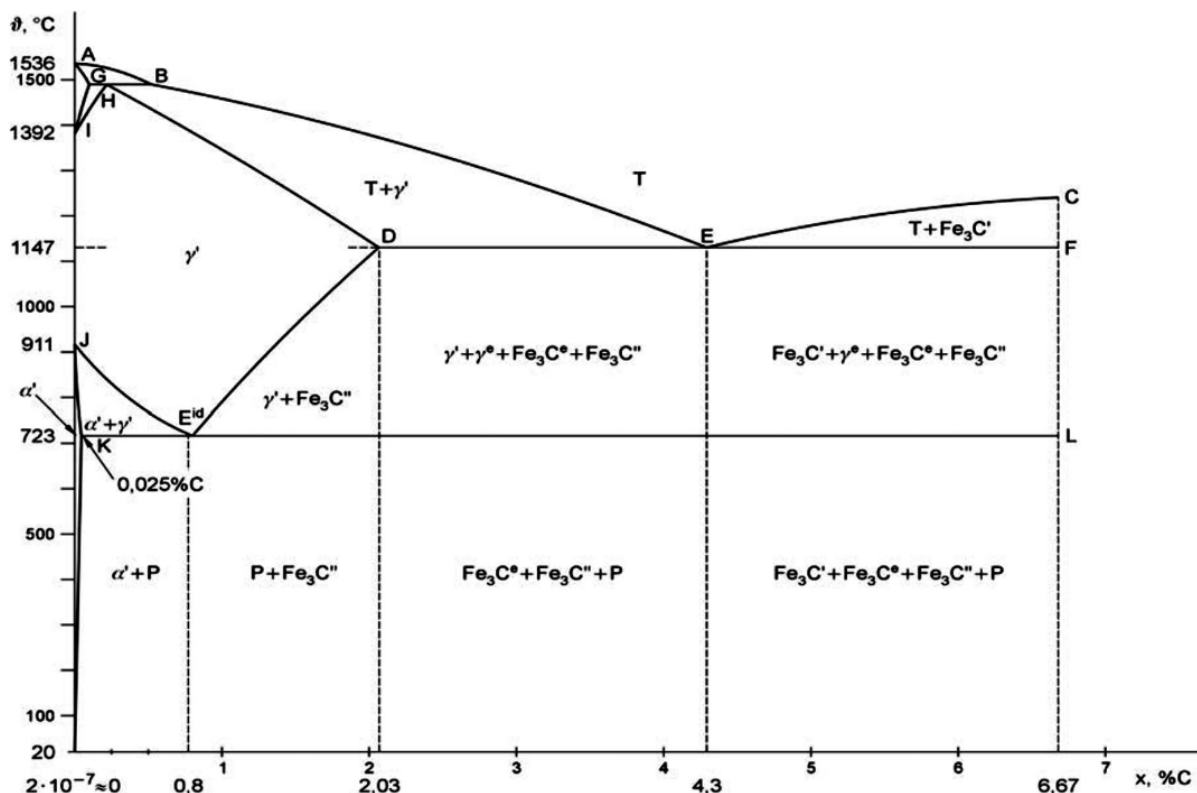
Tehnički materijali predstavljaju temelj civiliziranog društva i od ključne su važnosti za napredak civilizacije. Temeljito poznavanje tehnologija za proizvodnju i proučavanje svojstava i strukture tehničkih materijala neće izgubiti na relevantnosti dokle god opstaje industrijski orijentirano društvo koje ovisi o masovnoj proizvodnji i računa na prosperitet putem razvoja tehnologije. Među najstarijim skupinama tehničkih materijala nalaze se metali. Vađenje metalnih ruda i obrada metala ljudima je poznata još od davnina. Poznato je da su se već 6000 godina pr. Kr. [1] proizvodili komadi nakita od zlata, a ono se koristilo i za trgovinu zbog svojeg atraktivnog izgleda. Oko pet tisućljeća pr. Kr. počelo je razdoblje intenzivnog razvoja metalurgije i otkrivanja novih metala. Tako su se zaredala razdoblja koja su, zbog brojnih arheoloških nalaza obrađenih metala iz tog doba, nazvana "metalnim dobima". Prema troperiodnom sustavu podjele prapovijesti, kojeg je uveo Christian Jürgensen Thomsen povezujući povijest ljudskoga roda s materijalima od kojih se izrađivalo oruđe i oružje, tri su sukcesivne prapovijesne etape: kameno, brončano i željezno doba [2]. Ovo posljednje, kojim se u Europi naziva razdoblje od 1200. do 550. g. pr. Kr., obilježeno je rastom popularnosti željeza, koje se do tada smatralo inferiornim materijalom jer još nije bila otkrivena tehnologija za postizanje njegove temperature taljenja u svrhu obrade i preoblikovanja. Zahvaljujući otkriću čelika, željezo je danas jedan od najpopularnijih metala, a zajedno s ostalim metalnim materijalima omogućuje gradnju željeznica, zgrada i mostova, kao i proizvodnju svih prijevoznih sredstava, od automobila do raketa. Porast globalne ekonomije i široko prisutna individualna težnja poboljšanju životnog standarda u posljednjim su desetljećima doveli do tolikog porasta u potražnji za metalima da je, prema zadnjim podacima, samo u dvadesetom stoljeću u rudnicima diljem svijeta izvađena veća količina metalnih ruda od količine izvađene od početka povijesti čovječanstva pa sve do 1900. godine [1].

S obzirom da su metalni materijali, a osobito čelici, nezaobilazan i visoko tražen resurs u suvremenom svijetu, inženjeri i znanstvenici motivirani su raditi na konstantnom poboljšavanju njihovih svojstava. Kontinuiranim povećanjem znanja o tehnologijama proizvodnje i obrade legura, čelici se guraju do samih granica onoga što bi se od njih moglo očekivati. Istraživanjem granica eksploatacijskih kvaliteta javlja se i potreba za razvojem novih teorijskih i eksperimentalnih pristupa koji omogućuju istraživanje različitih aspekata eksploatacije. Sve je popularniji fundamentalan pristup, koji se ne oslanja na prosječne vrijednosti već uzima u obzir mehanizme koji se odvijaju na vrlo finim razinama materije. Nove tehnologije ulaze u sferu starih i ondje

pronalaze primjenu. U sklopu ovog rada nastojat će se prikazati jedan primjer interdisciplinarnog pristupa u modeliranju materijala. Radi se o višerazinskim metodama, koje su posljednjih desetljeća postigle velik uspjeh u povezivanju znanosti o materijalima, koja se bavi proučavanjem strukture materijala i metodama za ispitivanje njihovih svojstava, i mehanike materijala, koja se bavi razvijanjem teoretskog okvira i numeričkih modela za predviđanje ponašanja materijala u uvjetima eksploatacije. U praktičnom dijelu bit će napravljen niz proračuna koji se nadovezuju na doktorsku disertaciju dr. sc. Zorana Tomića, u kojoj su obavljene eksperimente čije će se vrijednosti ovdje koristiti.

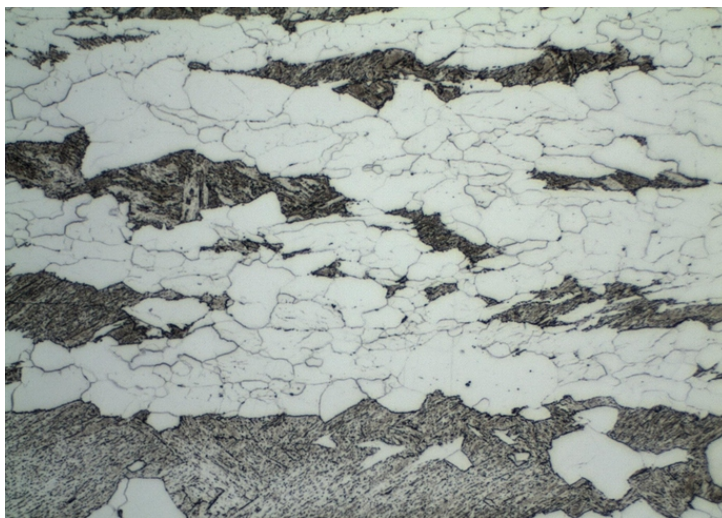
2. Mikrostruktura materijala

Skupini metalnih materijala pripadaju svi tehnički materijali proizvedeni korištenjem elementarnih metala (npr. bakar, titan, željezo, krom, mangan, ...) i određenih dodataka, metalnih ili nemetalnih, koji se obično nazivaju legirnim elementima. Dodavanjem legirnih elemenata postiže se, ovisno o eksploatacijskim zahtjevima, željena modifikacija svojstava metalnog materijala te se tako dobiva metalna legura (ili slitina). Legiranje se postiže miješanjem rastaljenog osnovnog metala i legirnih elemenata u peći pri vrlo visokim temperaturama kako bi se osiguralo dovoljno dobro miješanje i otapanje legirnih elemenata u osnovnom metalu. Hlađenje takve taline provodi se u kontroliranom režimu, s namjerom dobivanja točno određene mikrostrukture, jer iz znanosti o materijalima poznato je da mikrostruktura materijala određuje kako će se oni ponašati u eksploataciji, uslijed primijenjenog vanjskog opterećenja. Mikrostruktura metala neposredan je rezultat kemijskog sastava i povijesti obrade određene legure [3]. Najzastupljenija metalna legura je Fe-C legura, kod koje se variranjem masenog udjela legirnog elementa, ugljika, može dobiti čelik ili željezni lijev. Na slici 1 prikazan je fazni dijagram za leguru željezo-ugljik, gdje je na apscisi prikazan postotak mase ugljika otopljenog u željezu, a na ordinati temperatura. Kristalizacijom Fe-C legure dolazi do pojave intermetalnog spoja Fe_3C



Slika 1: Fe-C fazni dijagram [4]

(cementit), i to isključivo pri udjelu 6,67% ugljika. Legure s udjelom ugljika većim od 0%, a manjim od 2,03% su čelici, a udjelom od 2,03% do 6,67% ugljika dobivaju se bijeli ljevovi [5]. Najgornje područje ($T=talina$) i područje austenita (γ') jedina su područja u temperatura-sastav ravnini koja označavaju potpunu otopivost u tekućem odnosno krutom stanju. Ako se promatra samo dio dijagrama lijevo od sastava 2,03%, koji odgovara čelicima, moguće je identificirati nekoliko karakterističnih vrsta kristalizacije koje rezultiraju određenim tipovima mikrostrukture. Tako se u tzv. pondeutektoidnom području (udio C manji od 0,8%) hlađenjem ispod temperature 723 °C ostvaruje heterogena mikrostruktura koja sadrži primarne kristale α' , koji su gotovo čisto željezo (maksimalna otopivost ugljika je 0,025%, i to tek pri temperaturi 723 °C), i perlit, koji je heterogena pseudofaza sastavljena od eutektoidnog ferita i cementita Fe_3C^{id} [5]. Primjer takve mikrostrukture može se vidjeti na slici 2, gdje je bijela homogena faza ferit, a tamna lamelirana perlit. Ovakve 2D metalografske snimke dobivaju se raznim tehnologijama, a neke od najpoznatijih su SEM (eng. *scanning electron microscopy*), TEM (eng. *transmission electron microscopy*) i X-ray metoda, koje se primjenjuju na poliranoj površini materijala [3]. No,



Slika 2: Karakteristična heterogena mikrostruktura čelika [6]

mikrostruktura čelika ne ovisi samo o kemijskom sastavu, već i o brzini hlađenja taline. Fazni dijagrami obično se crtaju s pretpostavkom termodinamičke ravnoteže faza, koja se u stvarnosti nikada ne postiže jer bi za njezino postizanje hlađenje taline trebalo biti beskonačno sporo. U realnim procesima obrade legura ponekad je i poželjno da se talina ohladi brzo (npr. kaljenje čelika) kako se difuzija ugljika u kristalnu rešetku željeza ne bi odvila spontano-time se dobiva martenzitna struktura koju odlikuje deformirana kristalna rešetka koja materijalu na makrorazini daje izrazitu tvrdoću, ali i krhkost [5]. Najmanja brzina hlađenja kojom se dobiva 100%

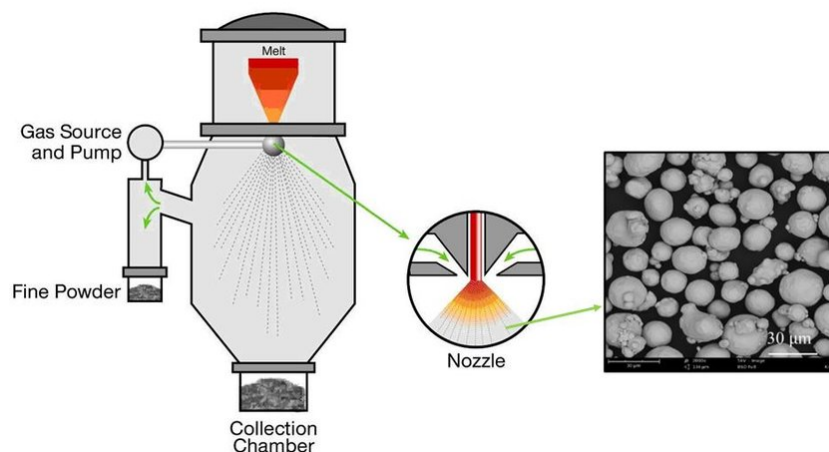
martenzitna struktura zove se gornja kritična krivulja gašenja. Ako je brzina hlađenja manja od gornje kritične, dobiva se mikrostruktura s martenzitom i novom fazom, bainitom, koji je pseudofaza sastavljena od ferita i cementita, a od perlita ga razlikuje nelamelarna struktura. Bainit je tvrdi od perlita, a mekši od martenzita [5]. Struktura čelika može se, ovisno o parametrima koji određuju fazne pretvorbe, sastojati od raznih kombinacija ferita, bainita, perlita i martenzita, a prisutnost i morfologija tih faza odlučuju o konačnim svojstvima proizvedenog čelika [1].

3. Metalurgija praha

Metalurgija praha je suvremena proizvodna tehnologija sa širokom primjenom u industriji. Omogućava proizvodnju strojnih i konstrukcijskih dijelova visoke preciznosti uz izrazito mali gubitak materijala, zbog čega je ekonomski atraktivnija od klasičnih tehnologija oduzimanja materijala, poput npr. tokarenja i blanjanja. Proces metalurgije praha temelji se na nekoliko ključnih koraka: proizvodnji praha, kompaktiranju (zbijanju), sinteriranju i završnoj obradi.

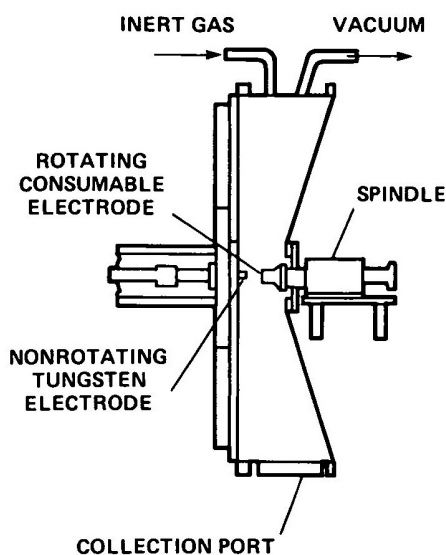
3.1 Proizvodnja metalnog praha

Proces proizvodnje tehnologijom metalurgije praha počinje s proizvodnjom metalnog praha. Postoji više načina za dobivanje metalnog praha [7]. Procesom atomizacije (slika 3) rastaljeni se metal pod tlakom propušta kroz mlaznicu, u koju se pumpom iz drugog spremnika ubrizgava plin. U kontaktu s rastaljenim metalom plin se naglo zagrijava, a budući da su temperatura i specifični volumen plina proporcionalni, on isto tako i naglo ekspandira, zbog čega dolazi do raspršenja plina s česticama rastaljenog metala u spremniku koji se nalazi ispod mlaznice. Taj je spremnik također ispunjen plinom kako bi se pospješila turbulencija prilikom upadanja metalnih čestica, koje time poprimaju sferni oblik skrućuju se. Jedna od najvećih mana procesa atomizacije je izrazito niska iskoristivost (oko 1%) u omjeru snage koja je potrebna za protiskivanje taline kroz mlaznicu i dobivenih atomiziranih čestica metalnog praha. Velika mana je također slaba mogućnost kontroliranja uniformnosti veličine čestica, tako da se dobivaju čestice širokog spektra promjera. Najmanji promjer čestica kojeg je moguće ostvariti ovim postupkom jest oko 10 μm [9]. Kod proizvodnje metalnog praha centrifugalnom tehnikom (slika 4) metal



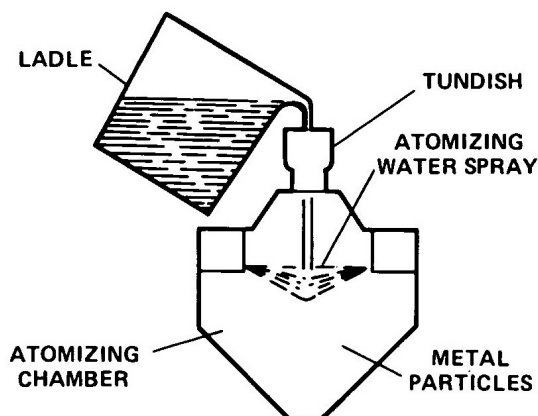
Slika 3: Proizvodnja metalnog praha procesom atomizacije, [8]

u čvrstom stanju u obliku štapa navodi se u komoru kroz vreteno koje rotira velikom brzinom. Nasuprot vrha vretena nalazi se Wolframova elektroda koja proizvodi električni naboj zagrijavajući metalni štapa. Zagrijan i električno nabijeni metal se u tankim slojevima tali, a rotacija vretena omogućuje da se kapljice odvoje od metala u vretenu i skrute se prije udaranja o zid komore s kojeg ih dalje odnosi plin koji cirkulira komorom. Metalni se prah može se proizvo-



Slika 4: Centrifugalna tehnika proizvodnje metalnog praha, [9]

diti i procesom atomizacije vodom, u kojem se tanki sloj taline kroz lijevak dovodi u kontakt s atomiziranim vodenim sprejem (slika 5). Vodeni sprej raspršuje tanku nit rastaljenog metala na sitne čestice koje ubrzo kristaliziraju i padnu na dno posude. Ovakvim se postupkom dobivaju sitnije čestice nego procesom atomizacije pomoću ekspandirajućeg plina.

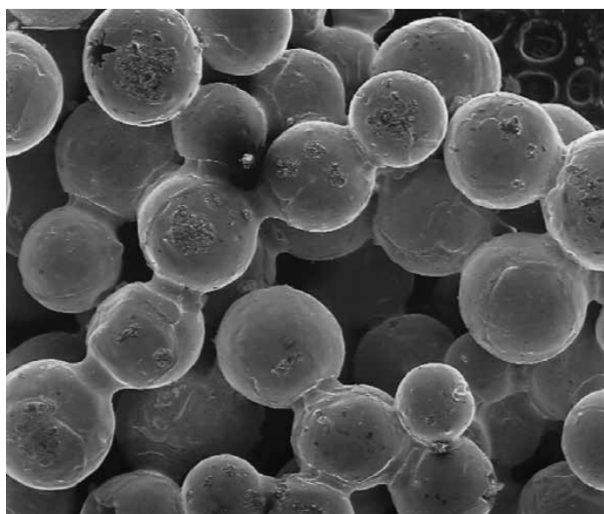


Slika 5: Atomizacija vodenim sprejem, [9]

3.2 Kompaktiranje i sinteriranje

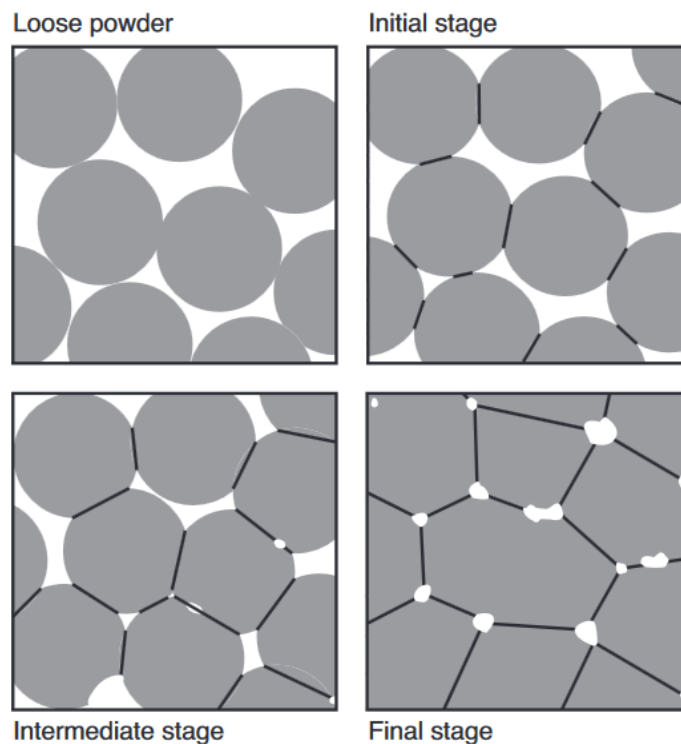
Jednom kad je metalni prah proizveden i pomiješan s lubrikantom kako bi se pospješilo tečenje, ubacuje se u matricu u kojoj se preša određenom silom ne bi li se oblikovao u željeni oblik i dimenzije [10]. Taj se korak zove kompaktiranje, a obično se provodi na mehaničkim prešama. Prah se najčešće kompaktira na sobnoj temperaturi, ali postoje i metode koje kombiniraju kompaktiranje sa zagrijavanjem (sinteriranjem) metalnog praha. Čak se nekad za kompaktiranje koriste i tradicionalne metode poput valjanja, kovanja i provlačenja. Na prešama za kompaktiranje može se direktno definirati tlak kojim se prah u matrici sabija. Ovisno o tlaku kompaktiranja mogu se dobiti proizvodi različite gustoće, a što je tlak sabijanja veći to je veća i gustoća konačnog proizvoda.

Nakon kompaktiranja slijedi zagrijavanje "zelenog" proizvoda na visoku temperaturu, ispod temperature taljenja. Taj korak naziva se sinteriranje. Sinteriranjem dolazi do stapanja susjednih čestica praha zahvaljujući odvijanju procesa prijenosa mase na atomskoj razini. Na slici 6 vide se čestice bronze sinterirane pri 800 °C. Čestice praha, koje su opisane zakrivljenim plo-



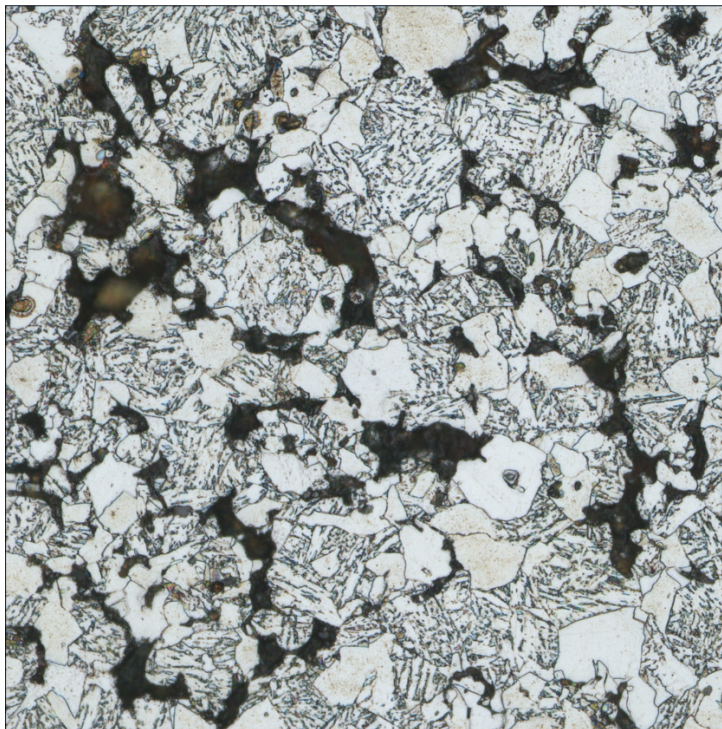
Slika 6: Sinterirane čestice bronze, $d = 26\mu\text{m}$ [11]

hama, sadrže veliku površinsku energiju koja se zagrijavanjem oslobađa i troši na stvaranje veza sa susjednim česticama [11]. U početnoj fazi sinteriranja sve su pore međusobno povezane, a na kraju se zatvaraju zbog porasta broja veza između čestica praha. Što je proces dulji i što je temperatura veća, to je veća povezanost čestica, a samim time i manji broj pora, koje sve više poprimaju sferni oblik (slika 7). Hlađenje sinteriranog materijala svakako ima utjecaj na to kakva će biti rezultirajuća mikrostruktura, u skladu s prethodno opisanim zakonitostima metalurških procesa. Važno je primijetiti da se mikrostruktura sinteriranog čelika bitno razlikuje



Slika 7: Rast veza i smanjenje pora u procesu sinteriranja [11]

od mikrostrukture čelika proizvedenog tradicionalnim tehnologijama, poput onog na slici 2, po tome što značajan volumenski udio u njegovoj mikrostrukturi imaju pore. Na primjeru sa slike 8, gdje je prikazana mikrostruktura sinteriranog čelika dobivenog kompaktiranjem i sinteriranjem praha podeutektoidnog sastava (najljeviji dio Fe-C faznog dijagrama na slici 1) s udjelom ugljika 0,2% u kristalnoj rešetki željeza. Takva snimka dobivena je, prema [12], mehaničkim poliranjem malih uzoraka sinteriranog čelika u epoksi matrici brusnim papirima različitih hrpavosti, a u posljednjoj fazi poliranja primijenjeno je 3 μm dijamantne paste i fluidni film od 0.03 μm . Uzorci su nakon toga uronjeni u nagrizaću tekućinu na bazi Nitala na par sekundi kako bi se otkrila heterogena mikrostruktura. Na snimci se jasno vide pore, koje su crne boje, nepravilnog oblika i nasumičnog rasporeda po mikrostrukturi. Mogu se jasno razlučiti i dvije različite materijalne faze: bainit i ferit. Kao što je već spomenuto u poglavlju 2., ferit je sam po sebi homogena faza, ali pojavljuje se isključivo kao mikrokonstituent u mikrostrukturi čelika. Druga faza, bainit, je ustvari heterogena struktura podeutektičkih karbida FeC uključenih u ferit. Zbog malog udjela ugljika bainitna je faza na ovom primjeru relativno svijetla, ako se usporedi s perlitnom fazom na slici 2 po čijoj se crnoj boji može sa sigurnošću tvrditi da ima veći udio ugljika. Ovakva mikrostruktura posljedica je svih toplinskih procesa kojima je materijal bio izložen, od proizvodnje metalnog praha pa sve do sinteriranja.



Slika 8: Mikrostruktura sinteriranog čelika Astaloy Mo+0,2C

3.3 Prednosti i mane proizvoda dobivenih metalurgijom praha

Prisutstvo pora u strukturi sinter-čelika poželjno je zbog smanjenja vibracija i buke, pa se zato mnogi dijelovi za prijenosnike snage, poput zupčanika, dobivaju sinteriranjem. Međutim, upravo su pore izvor koncentracije naprezanja i nastajanja mikropukotina koje u konačnici rezultiraju zamorom i popuštanjem konstrukcije, a poroznost mikrostrukture isto tako ima negativan utjecaj na njegova mehanička svojstva [12]. Materijali s većom poroznosti (većim volumnim udjelom pora) u pravilu imaju niži modul elastičnosti, granicu tečenja i vlačnu čvrstoću, što znači da su manje istezljivi i pucaju pri nižem narinutom opterećenju od manje poroznih materijala [12]. *Summa summarum*, proizvodnja metalurgijom praha ima razne prednosti, kao što su mogućnost stvaranja izrazito složenih oblika (što je ograničeno kod tradicionalnih tehnologija poput lijevanja), relativno mali gubitak materijala što znači i relativno velika ekonomska isplativost, i mogućnost visoke razine automatizacije samog procesa [10]. No proizvodi dobiveni metalurgijom praha porozni su i ponekad je bitno detaljno poznavati mehanizme koji se odvijaju u njihovoj strukturi na mikrorazini. U ovom će se radu nastojati u kratkim crtama dati uvid u mogućnosti detaljnog modeliranja mikrostrukture poroznog materijala kako bi se negativan utjecaj poroznosti što bolje upoznao, opisao i predvidio.

4. Podrijetlo eksperimentalnih podataka

Utjecaj mikrostrukture na mehanička svojstva materijala poznat je već desetljećima, no u praksi još je uvijek nemoguće točno odrediti mehanička svojstva materijala koristeći teorijske modele. U mikrostrukтури realnih materijala javljaju se razne nepravilnosti, poput dislokacija u kristalnoj rešetki željeza [5], za koje još uvijek ne postoji općepriznata metoda modeliranja. Zbog toga su eksperimenti i dalje neizbježan dio znanstvenog istraživanja u područjima znanosti o materijalima i mehanike materijala. Ovo će poglavlje donijeti kratak pregled eksperimentalnih metoda kojima se određuju mehanička svojstva materijala na makrorazini, jednoosnim vlačnim testom, isto kao i na mikrorazini, instrumentiranom indentacijom.

4.1 Makroskopski jednoosni vlačni test

Kod eksperimentalnog ispitivanja mehaničkih svojstava materijala na makrorazini, jednoosni vlačni test sasvim je sigurno najzastupljenija metoda. Naziva se još i statički vlačni pokus. Provođi se na posebno oblikovanim uzorcima, tzv. "epruvetama" (slika 9), koje se oprećuju u smjeru uzdužne osi kidalicom, strojem velike snage koji je osmišljen upravo za takva ispitivanja. Epruveta se u kidalicu pričvršćuje pritezanjem njezinih krajeva u čeljusti kidalice. Prilikom



Slika 9: Ispitni uzorci pripremljeni za jednoosni vlačni test [13]

rastezanja epruveta se sužava na mjestu otprilike jednako udaljenom od oba kraja (slika 10). Odziv materijala, to jest međuodnos narinutog opterećenja i promjene dimenzija, pruža dragocjen uvid u konstitutivno ponašanje materijala, jer se točno vidi koliko se materijal opire opterećenju, koliko opterećenje može podnijeti bez da se nepovratno deformira (bez da uđe u plastično



Slika 10: Rastezanje epruvete uz pomoć kidalice

područje) i koliko se jakom silom može opteretiti prije nego što pukne. Podaci o primijenjenoj sili i odgovarajućem produljenju koriste se kako bi se prikazao dijagram sila-produljenje, iz kojega se numerički dolazi do dijagrama naprezanje-deformacija. Relacija je jednostavna, budući da je naprezanje σ u slučaju jednoosnog opterećenja jednostavno definirano kao omjer sile F i početne površine poprečnog presjeka epruvete A_0 ,

$$\sigma = \frac{F}{A_0}, \quad (4.1)$$

a deformacija ε kao omjer produljenja Δl i početne duljine epruvete l_0 ,

$$\sigma = \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (4.2)$$

Na dijagramu ovisnosti vanjskog opterećenja o deformaciji, tj. $\sigma - \varepsilon$ dijagramu, za čelične uzorke dobiva se krivulja iz koje se mogu odrediti određeni parametri kojima se kvantificira ponašanje materijala. Dijagram se sastoji od dva karakteristična dijela: elastičnog i elasto-plastičnog. Početni dio krivulje opisuje linearno elastično ponašanje, a opisan je Hookeovim zakonom

$$\sigma = E \cdot \varepsilon, \quad (4.3)$$

u kojem E predstavlja modul elastičnosti, također poznat kao Youngov modul, odnosno parametar koji određuje konstitutivno ponašanje u linearno elastičnom području (nagib pravca koji opisuje konstitutivno ponašanje u linearno-elastičnom području). Ovakvi izrazi koji povezuju opterećenje i odziv, tj. naprezanje i deformaciju, u mehanici kontinuuma nazivaju se konstitutivnim izrazima.

Ispitivanja u [12] provedena su na trima epruvetama proizvedenima od praha podeutektoidnog čelika Astaloy Mo+0,2C tvrtke Hoganas iz Švedske. Epruvete su kompaktirane na sobnoj temperaturi, s različitim tlakovima: 360, 440 i 600 MPa. Nakon kompaktiranja provedeno je sinteriranje pri konstantnoj temperaturi od 1120 °C. Sinterirani uzorci ohlađeni su brzo do 70 °C, a zatim sporo do sobne temperature. Na taj su način dobivena tri uzorka različitih gustoća: 6,5, 6,8 i 7,1 g/cm³, čime je dobivena porozna mikrostruktura s dvije materijalne faze: ferit i bainit. U tablici 1 prikazani su rezultati vlačnog testa za sve tri gustoće. Te su vrijednosti preuzete iz

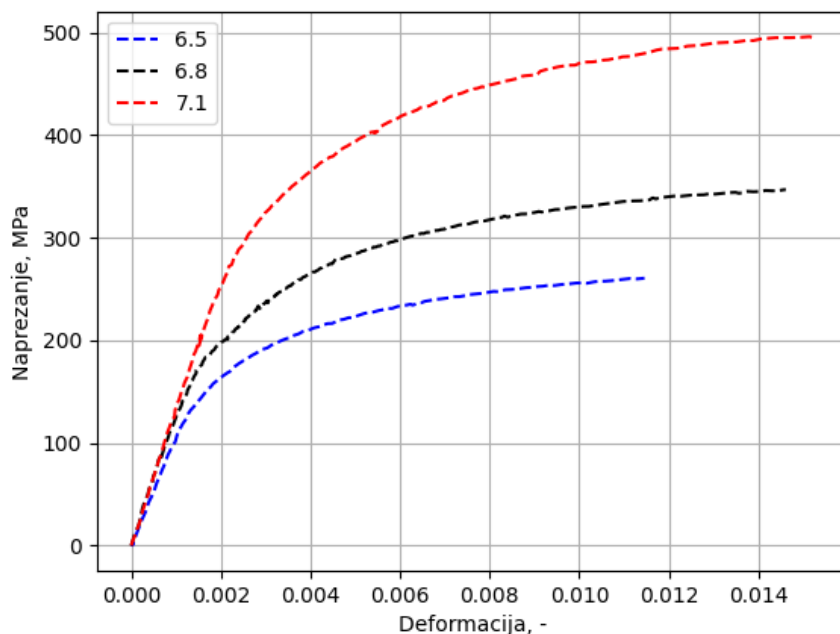
Tablica 1: Mehaničke karakteristike sinteriranog čelika

Gustoća, g/cm ³	Modul elastičnosti, GPa	Granica tečenja, MPa	Vlačna čvrstoća, MPa
6,5	98,2	218,9	269,8
6,8	115,1	242,5	326,7
7,1	131	369	471,7

[12] i prikazane dijagramom, kao tri krivulje, na slici 11. Budući da je kod sinteriranih materijala gustoća određena volumnim udjelom pora, logično je da materijali s većom poroznošću imaju manju gustoću, a iz krivulja za različite gustoće, kao i iz tablice 1, jasno se može vidjeti da materijali manje gustoće (odnosno veća poroznost) pokazuju niže vrijednosti mehaničkih karakteristika, jer plava krivulja ima najmanji nagib Hookeovog pravca, što ukazuje na najmanji modul elastičnosti isto kao i najmanju vlačnu čvrstoću i granicu tečenja.

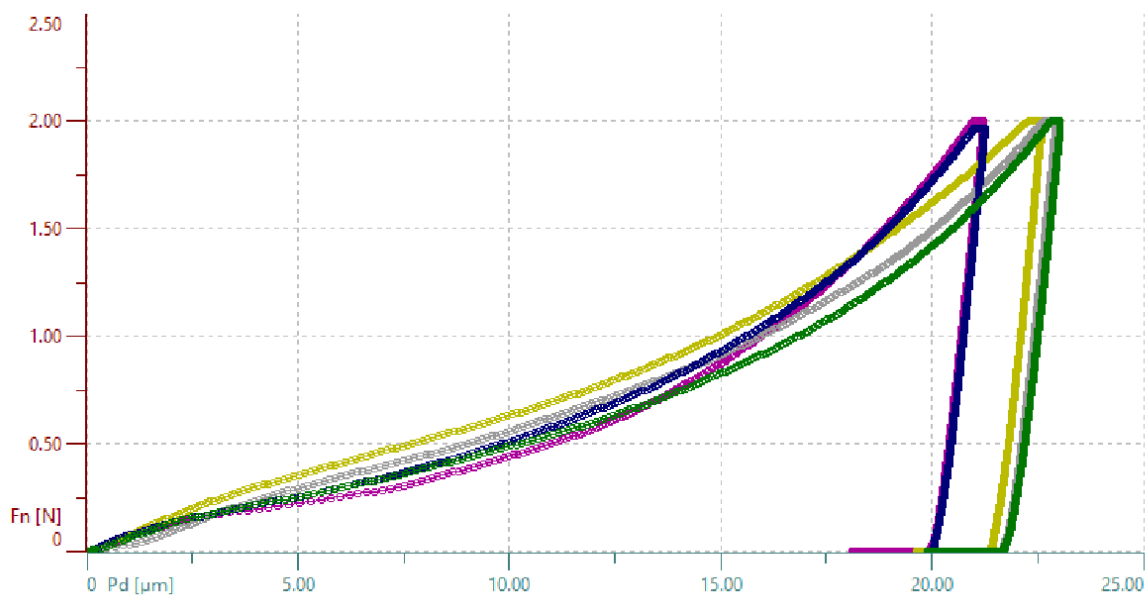
4.2 Instrumentirana indentacija

Kod ispitivanja mehaničkih svojstava mikrostrukturnih faza raznih materijala, od metala i keramika pa sve do polimera i biomaterijala, sve se više koristi metoda instrumentirane indentacije, također poznate kao nanoindentacija [14]. Radi se o metodi u kojoj se precizno oblikovanim penetratorom prodire u površinu materijala kontroliranom silom koja se mijenja po određenoj krivulji, a pritom se prikupljaju podaci o dubini prodiranja u površinu uzorka. Penetrator mora biti napravljen od materijala visoke tvrdoće, a u slučaju ispitivanja koje je provedeno u [12] riječ je o oštrom dijamantnom indenteru prema standardu za Vickersov test tvrdoće (oblik četversotrone piramide s vršnim kutom 136°). Sila se tijekom testiranja kontinuirano povećava, a nakon što uređaj za indentaciju postigne maksimalnu vrijednost opterećenja, slijedi kontrolirano rasterećenje. Dubina prodiranja cijelo se vrijeme mjeri te se tako opisuje krivulja inden-



Slika 11: Makroskopske krivulje naprezanje-deformacija za različite gustoće

tacije. Nekoliko takvih krivulja prikazano je na slici 12, preuzetoj iz dokumentacije od Anton Paar Micro Combi Testera MCT³, koji je korišten u radu [12]. Budući da krivulja indentacije ne



Slika 12: Krivulje indentacije za različite čestice [15]

pruža direktnu informaciju o vrijednostima modula elastičnosti, granici tečenja i ostalim plastičnim parametrima, potrebno je provesti numerički postupak transformacije krivulje indentacije

u krivulju naprezanje-deformacija. Bez detaljnog opisa spomenutih transformacija, ovdje će biti prikazane vrijednosti dobivene trima metodama, tj. Giannakopoulos, Giannakopoulos FS i Dao, koje su temeljito opisane u [12] i u literaturi koja je citirana u tom radu. U tablici 2 prikazane su vrijednosti modula elastičnosti E , inicijalne granice tečenja σ_y^0 , parametra očvršćenja K i eksponenta očvršćenja n . Navedenim se vrijednostima opisuje elastoplastično ponašanje

Tablica 2: Elastični i elastoplastični parametri feritne i bainitne faze sinteriranog čelika

	E , GPa	σ_y^0 , MPa	K , MPa	n , -
Ferit				
Giannakopoulos	186	67,4	1484	0,4994
Giannakopoulos FS		159	772	0,2547
Dao		98,2	526	0,2704
Bainit				
Giannakopoulos	239	453	2386	0.274
Giannakopoulos FS		438	1424	0,1936
Dao		232	874	0,2143

materijala, koje počinje izlaskom iz elastičnog područja u trenutku kad naprezanje u materijalu postigne vrijednost veću od granice tečenja (tad prestaje vrijediti Hookeov zakon (4.3)). Postoje razni modeli elastoplastičnosti, a u ovom se radu primarno koristio tzv. *power-law* model, za kojeg vrijedi

$$\sigma = \begin{cases} E \cdot \varepsilon & , \text{ ako je } \sigma \leq \sigma_y^0 \\ K \cdot \varepsilon^n & , \text{ ako je } \sigma > \sigma_y^0. \end{cases} \quad (4.4)$$

5. Višerazinsko modeliranje materijala

Proračuni provedeni u sklopu ovog diplomskog rada pripadaju interdisciplinarnom području višerazinskog modeliranja, koje je posljednjih desetljeća doživjelo porast u popularnosti i primjenjivosti, a zaslužno je za povezivanje znanosti o materijalima i mehanike materijala. Cilj ovog poglavlja bit će ukratko opisati širu sliku područja numeričkih metoda u koju se uklapa praktičan dio ovog diplomskog rada.

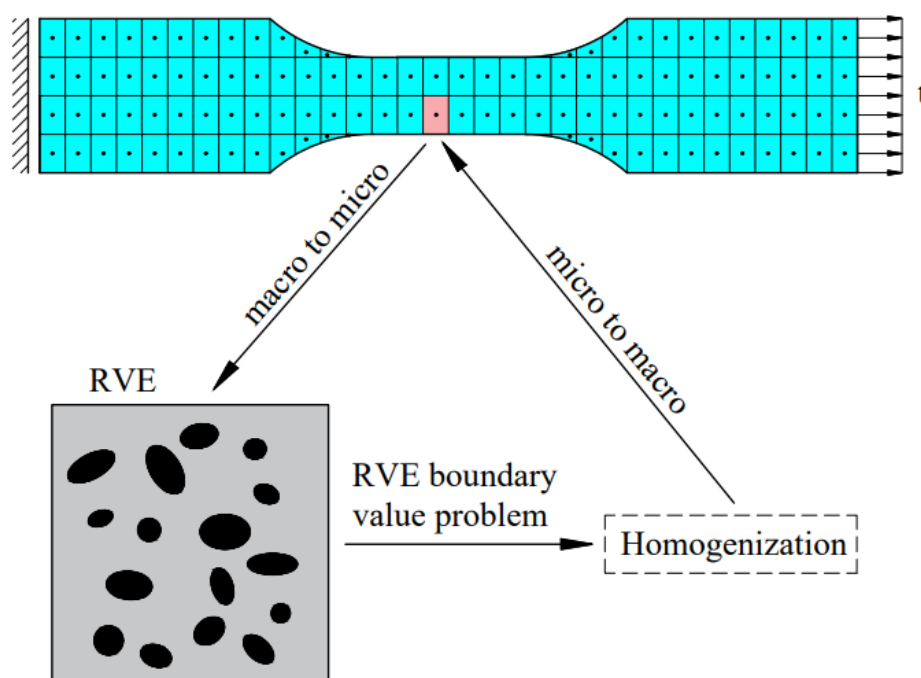
5.1 Višerazinske metode

Hijerarhija materijalne strukture može se razvrstati, od najviše prema najnižoj, na:

- makrorazinu;
- mikrorazinu;
- nanorazinu;
- atomsku razinu.

O atomskoj razini ovdje neće biti govora jer je ona u glavnoj struji mehanike čvrstih tijela još uvijek irelevantna s praktičnog stajališta. Mikrorazina podrazumijeva razinu tri reda veličine manju od elementarne duljinske mjere u strojarstvu, milimetra. Nanorazina je još tri reda veličine manja. Svi materijali koji se koriste u tehnici heterogeni su na nekoj od tih razina, a obično je već na mikroskopskom nivou lako uočiti i definirati razliku između materijalnih faza. Uobičajeno je zanemariti događaje na razinama nižim od makrostrukture ne bi li se na jednostavniji (i jeftiniji) način došlo do zadovoljavajućih tehničkih rješenja. Na makrorazini mnogi se materijali, poput čelika, tretiraju kao homogeni i takav je pristup uglavnom uspješan. Uz pretpostavku makroskopske homogenosti razvijaju se teorije i modeli koji u principu barataju s uprosječenom predodžbom mehanizama koji se odvijaju na nižim razinama. Međutim, u određenim se područjima mehanike tijekom posljednjih nekoliko desetljeća istaknula potreba za fundamentalnijim pristupom. Do toga su dovele nepredviđene i opipljive posljedice događaja poput međusobnih interakcija granica mikrostrukturnih zrna, faznih promjena, nastajanja mikropukotina, koji su po naravi izrazito kompleksni i odvijaju se na ljudskom oku nepristupačnoj razini. Modeli makrostrukturnog odziva materijala nemaju dovoljno čvrste temelje i često značajno gube na preciznosti u situacijama kada se lokalizirani mikroskopski mehanizmi u strukturi materijala odražavaju na makroskopski odziv. Mikromehanički pristup, temeljen na pravilu

smjesa (eng. *rule of mixtures*), pokazao se dobrim kod modeliranja konstitutivnog ponašanja mikroskopski heterogenih materijala. Danas postoje brojni modeli za proračune na svim razinama pa bi se kao logično poboljšanje moglo činiti usvajanje nove paradigme "niskorazinskog" pristupa. Međutim, takav pristup često proizvodi previše podataka o fundamentalnim mehanizmima daleko od područja u kojem ih je nužno razumjeti, što stvara preopterećenje količinom podataka i potrebnih računalnih resursa [16]. Kao prirodna posljedica problematike takve vrste javila se motivacija za razvoj višerazinskih metoda. Kombinacijom efikasnog "uprosječenog" makroskopskog pristupa (koji počiva na hipotezi kontinuuma) i preciznog mikrostrukturnog modeliranja, višerazinskim se metodama nerijetko provode uspješne simulacije zadovoljavajuće točnosti i visoke podudarnosti s eksperimentalnim podacima [16]. Danas postoji cijeli niz višerazinskih metoda, a najpoznatije skupine su konkurentne (eng. *concurrent*) i hijerarhijske metode, koje se razlikuju po načinu na koji tretiraju međusoban odnos rješenja s različitih razina [17]. Konkurentne metode koriste međusobnu spregu makro- i mikrostrukturnog rješavanja problema rubnih vrijednosti (eng. *Boundary Value Problem, BVP*), slika 13. Ideja konkurent-



Slika 13: Shema konkurentnih višerazinskih metoda [17]

nih metoda jest da se problem simultano rješava na mikro- i makrorazini, a dobivena se rješenja međusobno potkrjepljuju, što predstavlja iskorak prema realističnijoj simulaciji u odnosu na klasičnu makrorazinsku. Na slici 13 prikazana je epruveta diskretizirana konačnim elementima, s rubnim uvjetom pomaka na lijevoj, a opterećenja na desnoj strani. Rješavanjem problema na

mikrostrukturnoj razini uz pomoć takozvanih reprezentativnih volumenskih elemenata (RVE-a) određuje se konstitutivno ponašanje na makrorazini, u konačnim elementima. Kod ovakve međusobne sprege mikroskopskog i makroskopskog rješavača nije potrebno znati konstitutivne relacije na makrorazini jer one proizlaze iz samog rješenja RVE-a. Druga skupina višerazinskih metoda jesu hijerarhijske metode, karakteristične po ulančanoj sprezi rješavača. Kod ulančane sprege efektivni model na makrorazini izvodi se postupkom pretprocesiranja mikrostrukturnog modela pa se stoga naziva i "mikroskopski informirano modeliranje" [16]. Tako dobiveni efektivni model zatim se koristi ne vodeći računa o daljnjim promjenama na mikrostrukturnoj razini. Najčešća dva tipa problema u višerazinskom modeliranju su:

Tip A: Problemi s izoliranim nepravilnostima poput pukotina, dislokacija, posljedica temperaturnog šoka isl. Kod ovakvih je problema mikroskopski model potreban jedino u blizini dotične nepravilnosti, a na ostalim dijelovima domene legitimna je primjena makroskopskog pristupa.

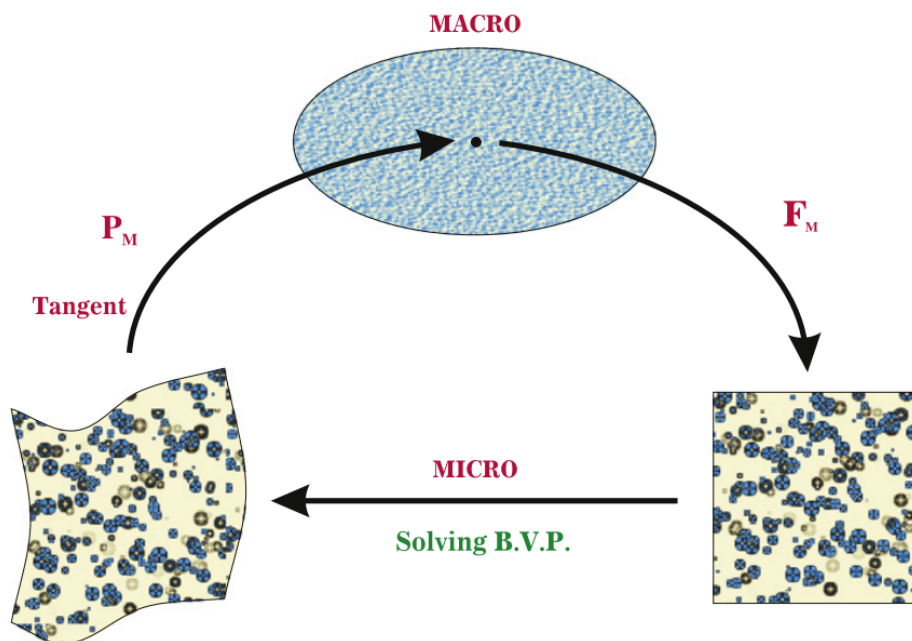
Tip B: Problemi bez posebnih pojava u mikrostrukтури koje bi omogućavale mikroskopski pristup na uskom području domene. Za rješavanje ovakvih problema izrađuju se ranije spomenuti reprezentativni volumenski elementi na kojima se provodi analiza, a homogenizirana rješenja upotrebljavaju se u makro-modelu.

Za probleme tipa A postoje razni pristupi, poput kvazikontinuumskog modela kojim se pronalaze načini za povezivanje proračunskih područja modeliranih pristupima na različitim razinama. Za probleme tipa B često nije dovoljna direktna homogenizacija mikrorazinskog rješenja pa se traže bolji pristupi. Postoje i problemi koji su kombinacija navedena dva, a proširenjem područja istraživanja javljaju se i novi [16].

5.2 Računalna homogenizacija

Kod problema tipa B spomenutih u 5.1, kod kojih postoji potreba za proučavanjem mikroskopske pozadine procesa deformiranja, a dobivanje konstitutivnih relacija na makrorazini je izrazito teško, koristi se računalna homogenizacija [18] kako bi se podaci o deformiranom stanju reprezentativnog volumenskog elementa ugradili u makroskopski model. Ovaj se pristup temelji na postavljanju problema graničnih vrijednosti (eng. *boundary value problem*, BVP) na reprezentativnom volumenskom elementu (RVE-u) te njihovom direktnom rješavanju pomoću numeričkog rješavača, najčešće metodom konačnih elemenata. Postoji više vrsta rubnih uvjeta

koji se mogu nametnuti proračunskoj domeni (RVE-u), a optimalne performanse za primjenu kod računalne homogenizacije pokazuju periodični rubni uvjeti [19], koji će u sljedećem poglavlju biti ukratko objašnjeni. Najstarija metoda računalne homogenizacije je homogenizacija



Slika 14: Računalna homogenizacija [20]

prvog reda, koja se temelji na linearizaciji makroskopskog polja pomaka. Kako bi se ukratko opisala njezina teorijska pozadina, potrebno je uvesti par novih veličina i oznaka. Za opisivanje procesa deformiranja u slučajevima kad dolazi do velikih deformacija koristi se veličina poznata kao gradijent deformiranja \mathbf{F} . Ona se definira kao

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \quad (5.1)$$

pri čemu je \mathbf{x} vektor položaja u trenutnoj konfiguraciji (opisuje deformirani položaj), a \mathbf{X} vektor položaja u referentnoj konfiguraciji (opisuje nedeformirano stanje). Sad kad je to definirano moguće je odrediti izraz za linearizaciju polja pomaka, koji poprima oblik

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{F}_M \cdot \Delta \mathbf{X} + \mathbf{w}. \quad (5.2)$$

Ovdje \mathbf{F}_M predstavlja tenzor gradijenta deformiranja koji proizlazi iz makroskopskog polja pomaka. Vektorski član \mathbf{w} predstavlja polje mikrofluktuacija koje implicira utjecaj mikrorazinskih mehanizama [20]. Iz (5.2) može se vidjeti da mikroskopsko polje pomaka ovisi o:

1. makroskopskom polju pomaka, izvedenom na makrorazini i

2. makroskopski nezavisnom polju mikrofluktucija, koje predstavlja doprinos mikrostrukture polju pomaka RVE-a.

Kod problema s velikim pomacima za naprezanja se koristi prvi Piola-Kirchhoffov tenzor naprezanja \mathbf{P} , koji se računa pomoću Cauchyjevog tenzora naprezanja $\boldsymbol{\sigma}$ kao:

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T}, \quad (5.3)$$

gdje je J Jacobijeva determinanta za koju vrijedi $J = \det(\mathbf{F})$. Prema shemi na slici 14 vidi se da je u premošćivanju različitih hijerarhijskih razina ključna komunikacija putem podataka o deformaciji i naprezanju. Kao što je već spomenuto, kod formulacije BVP-a na RVE-u preuzima se makroskopsko polje pomaka, a nakon što je metodom konačnih elemenata riješen mikrorazinski proračun, homogenizirani podaci naprezanje-deformacija prenose se nazad na makrorazinu (\mathbf{P}_M označava polje naprezanja na makrorazini). Računanjem volumenskog prosjeka varijabli na mikrorazini, gubi se podatak o mikrofluktucijama (vektor \mathbf{w} iz (5.2)) budući da one ne utječu na varijable na efektivnoj makrorazini [19]. U slučaju malih deformacija gubi se razlika između trenutne i referentne konfiguracije, a koristi se tenzor malih deformacija (ovdje u indeksnoj notaciji)

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (5.4)$$

pri čemu je u_i vektor pomaka, a x_i vektor položaja. Homogenizacija se provodi na način da se mikrofluktucije zamijene prosječnom vrijednošću na razini RVE-a. Za Cauchyjev tenzor naprezanja na mikrorazini, σ_{ij} , homogenizirani tenzor naprezanja $\bar{\sigma}_{ij}$ računa se pomoću izraza

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV. \quad (5.5)$$

Homogenizirana deformacija $\bar{\varepsilon}_{ij}$ proizlazi iz makroskopskog problema, kao što je slučaj za gradijent deformiranja na shemi 14. Iz homogeniziranih varijabli moguće je formulirati konstitutivnu relaciju, iz koje se dobivaju traženi materijalni parametri. Izraz (4.3) može se proširiti na trodimenzionalnu situaciju pa se dobije poopćeni Hookeov zakon

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (5.6)$$

gdje je C_{ijkl} elastični tenzor četvrtog reda (σ_{ij} i ε_{ij} tenzori su drugog reda). Stoga se tenzor elastičnosti za problem na makrorazini (homogenizirani tenzor elastičnosti) može izračunati kao

$$\bar{C}_{ijkl} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \bar{\varepsilon}_{kl}}. \quad (5.7)$$

Može se promatrati i plastično ponašanje, u kojem slučaju bi se radilo o drugačijoj konstitutivnoj relaciji. Ako se tenzor deformacija aditivno razlaže na elastični i plastični dio [21],

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p, \quad (5.8)$$

tad se može zapisati relacija

$$d\sigma_{ij} = D_{ijkl}^{ep} \cdot d\varepsilon_{kl}^p \quad (5.9)$$

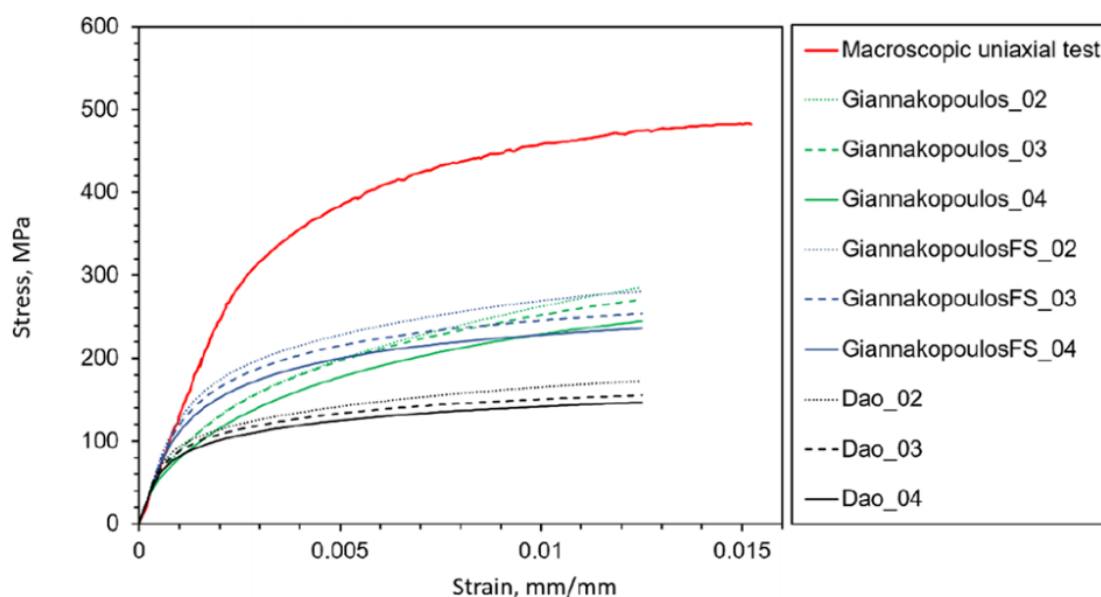
u kojoj je D_{ijkl}^{ep} elastoplastični tenzor krutosti, čija se homogenizirana vrijednost može izračunati analogno postupku prikazanom za elastični tenzor krutosti.

Kako bi se sumiralo sve napisano u ovom poglavlju, navedeni su osnovni koraci koji čine računalnu homogenizaciju, prema [18]:

1. Definiranje reprezentativnih volumenskih elemenata (RVE-a).
2. Formulacija rubnih uvjeta na mikroskopskom modelu uzimajući potrebne varijable iz makroskopskog modela.
3. Proračun mikroskopskog BVP-a i homogenizacija rezultata.
4. Određivanje numeričkog odnosa makroskopskog input-a i output-a (npr. jednažba (5.7)).

6. Određivanje mehaničkih karakteristika materijalnih faza sinteriranog čelika

U radu [12], iz kojeg su eksperimentalni podaci preuzeti, provedene su numeričke simulacije reprezentativnih elemenata mikrostrukture (RVE-a) na način da su na cijeloj desnoj i lijevoj granici definirani rubni uvjeti pomaka te je promatran odziv RVE-a, a materijalnim fazama dodjeljivane su vrijednosti parametara određene instrumentiranom indentacijom koje su prikazane u tablici 2. Rezultatima numeričke simulacije nije uspješno opisano ponašanje uzoraka na makrorazini, kao što se vidi iz dijagrama na slici 15, te je očito da mikroskopska simulacija znatno podcjenjuje odziv stvarnog uzorka. Cilj ovog poglavlja jest da se istraži postoji li eventualna usklađenost neke od mogućih kombinacija elastoplastičnih parametara (dobivenih različitim metodama rekonstrukcije $\sigma - \varepsilon$ krivulja) s makroskopskim odzivom uzoraka sinteriranog čelika.



Slika 15: Usporedba simulacije i eksperimenta [12]

6.1 Reprezentativni volumenski element

Definiranje reprezentativnih volumenskih elemenata (RVE-a) ključan je dio računalne homogenizacije. U ovom je koraku bitno imati na umu uvjete koji moraju biti ispunjeni da bi proračun bio točan. Postoji više načina na koji se može definirati RVE [18]. Jedna od definicija jest da je

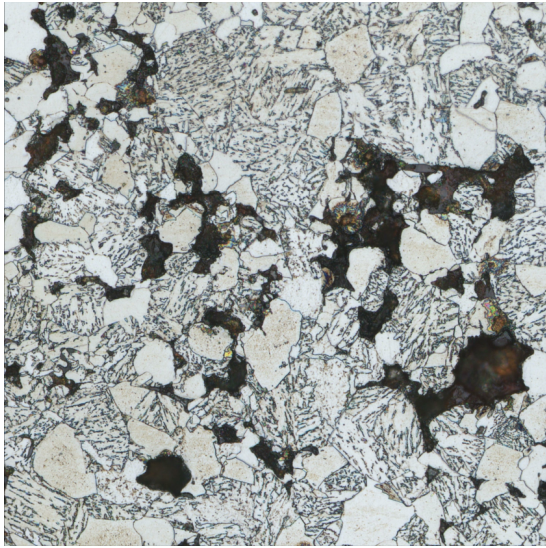
RVE statistički reprezentativan uzorak mikrostrukture, što znači da mora sadržavati uzorak svih mogućih mikrostrukturnih konfiguracija koje se mogu pojaviti u materijalu. Takvi RVE-ovi rijetko se koriste u računalnoj homogenizaciji jer bi, da se takav uvjet ispuni, uzorak trebao biti jako velik ako se radi o neuniformnoj mikrostrukturi, što je najčešće slučaj. Dugi način definiranja jest da se izabere najmanje područje mikrostrukture koje dovoljno precizno predstavlja efektivna makroskopska svojstva. Na taj način mogu se definirati manji RVE-ovi, što je dakako praktičnije i računalno jeftinije. Za potrebe ovog rada definirana su četiri RVE-a dimenzija $300 \times 300 \mu\text{m}$. Područja su odabrana iz metalografske snimke visoke razlučivosti, snimljene na poliranoj površini sinteriranog čelika gustoće $6,5 \text{ g/cm}^3$. Pomoću programa AutoCAD područja mikrostrukture pretvorena su u uzorke mikrostrukture kodirane RGB shemom bojanja (eng. *red-green-blue*), gdje su faze označene na sljedeći način:

- Ferit → zeleno
- Bainit → crveno
- Pore → plavo

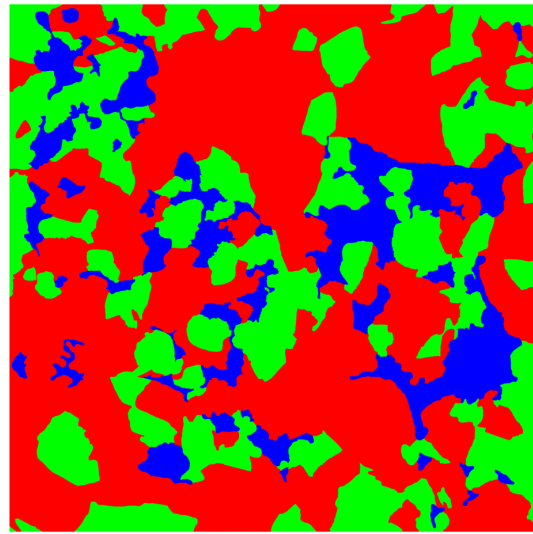
Tako napravljeni uzorci mikrostrukture, zajedno s odgovarajućim područjima s metalografske snimke, prikazani su slikama 16, 17, 18, 19. RGB shema bojanja odabrana je jer su ove slike učitavane u programski paket MATLAB, pomoću kojeg je provedena njihova analiza i grupiranje svakog od pojedinih piksela u odgovarajuću materijalnu fazu. Svaki piksel tim grupiranjem pretvara se u točno jedan konačni element na RVE-u, pridružen jednoj materijalnoj fazi. Područjima označenim plavom bojom (pore) bivaju pridružene vrijednosti koje se isključuju iz popisa konačnih elemenata, jer je u mreži na tim mjestima potrebno ostaviti prazan prostor. Koristeći tako "binarizirane" sheme mikrostrukture, pomoću MATLAB koda zapisane su datoteke s vrijednostima koje odgovaraju koordinatama čvorova konačnih elemenata kojima su reprezentativni volumenski elementi diskretizirani. Isti je postupak ponovljen za svaku od četiri mikrostrukturne sheme te su time dobivene četiri mreže konačnih elemenata prikladne za pripremu numeričkog proračuna.

6.2 Ispitivanje osjetljivosti mreže konačnih elemenata

Kod numeričkih analiza metodom konačnih elemenata ili metodom konačnih volumena, izrazito je bitno utvrditi neovisnost rješenja o gustoći proračunske mreže. Proračuni na grubo diskretiziranoj domeni daju rješenja relativno niske točnosti zbog toga što s manjom preciznošću

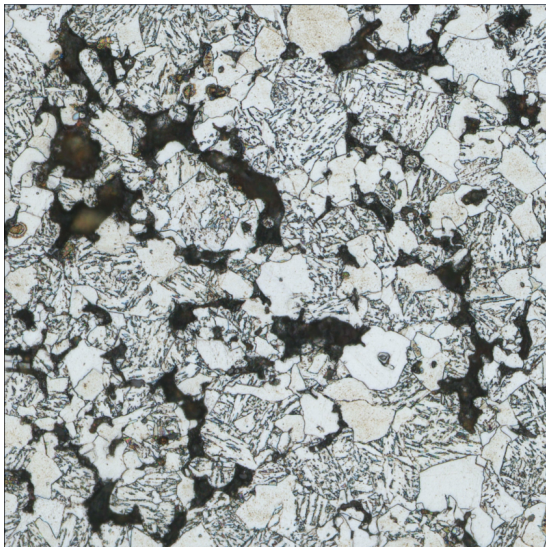


(a) Područje 1

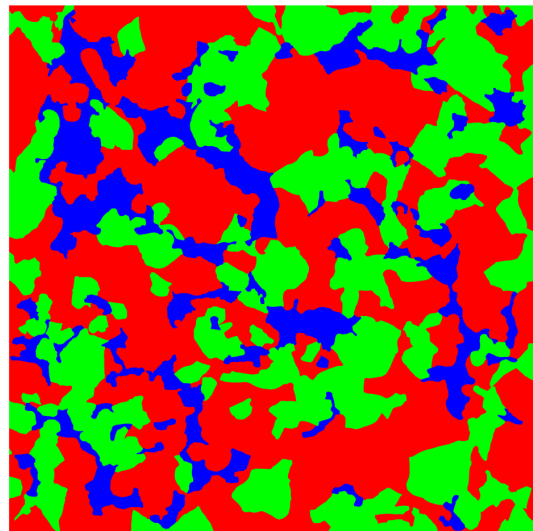


(b) Shema 1

Slika 16: Prvi RVE

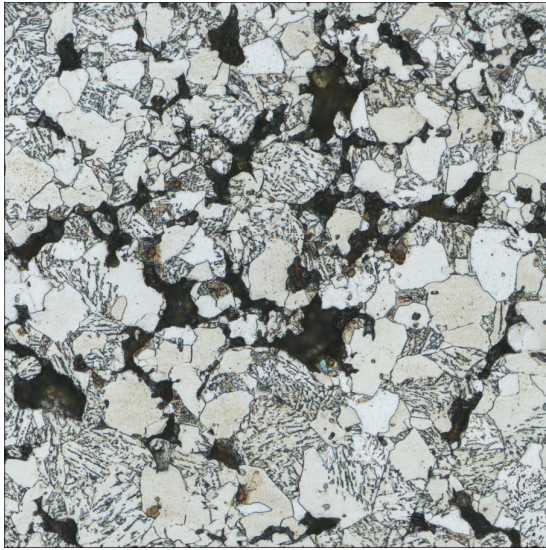


(a) Područje 2

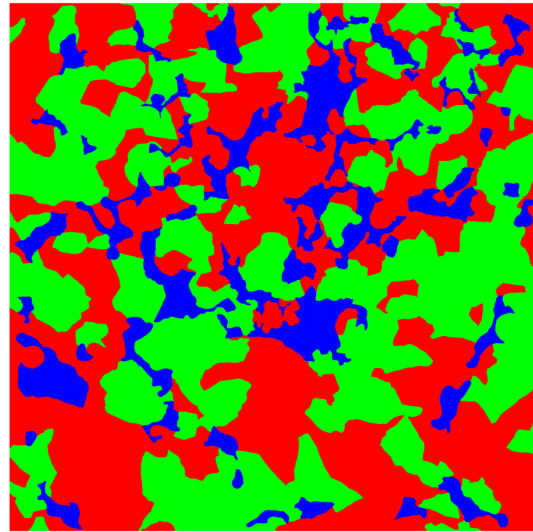


(b) Shema 2

Slika 17: Drugi RVE

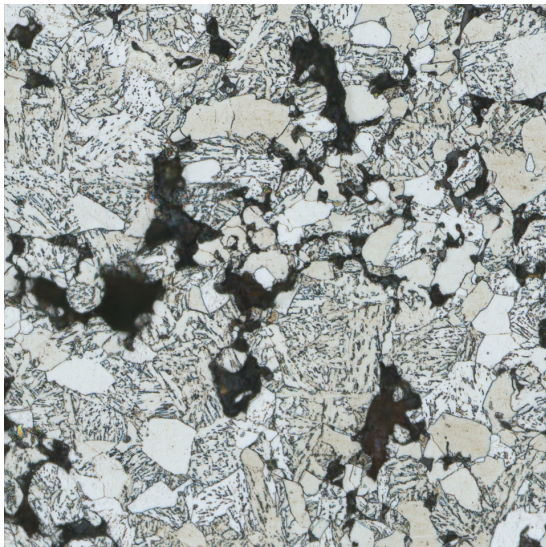


(a) Područje 3

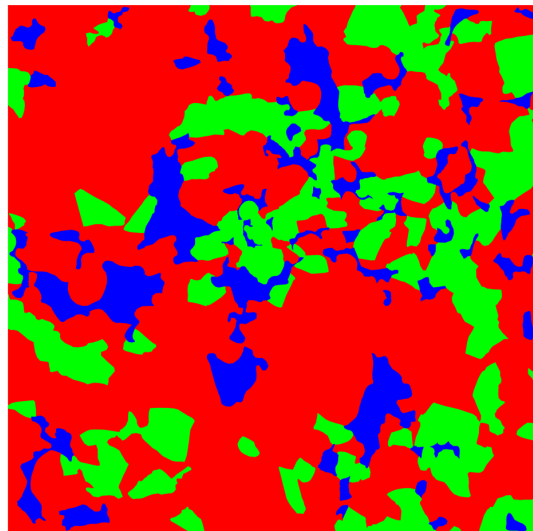


(b) Shema 3

Slika 18: Treći RVE

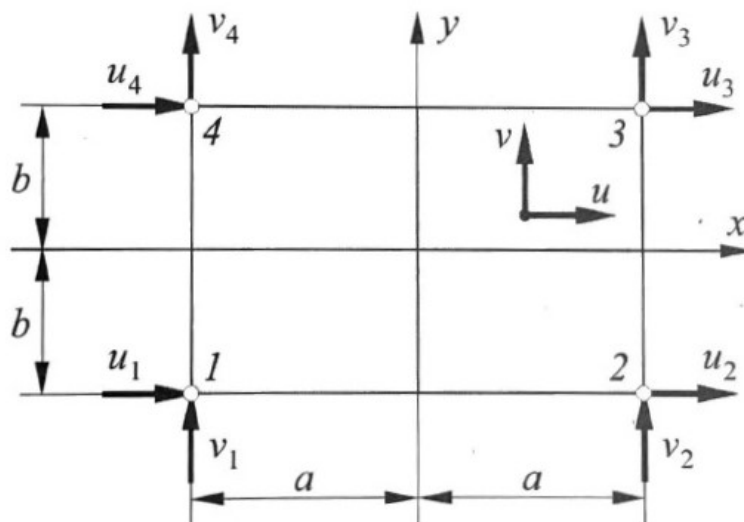


(a) Područje 4



(b) Shema 4

Slika 19: Četvrti RVE



Slika 20: Osnovni pravokutni konačni element [22]

opisuju fluktuacije u poljima fizikalnih veličina (npr. polju pomaka) nego proračuni na fino diskretiziranoj domeni. To je logično budući da oštra geometrija konačnih elemenata (najčešće su to prizme, piramide, kvadri, kvadrati ili trokuti) više izobličuje proračunsku domenu kada su konačni elementi veći, isto kao što računalna slika niske rezolucije na manje efikasan način prenosi informaciju o predmetu koji prikazuje nego računalna slika visoke rezolucije. Međutim, da bi diskretizacija proračunske domene bila fina, u slučaju većine industrijski relevantnih problema geometrijske mreže moraju sadržavati enormno velike brojeve konačnih elemenata. Metoda konačnih elemenata temelji na računanju globalne relacije

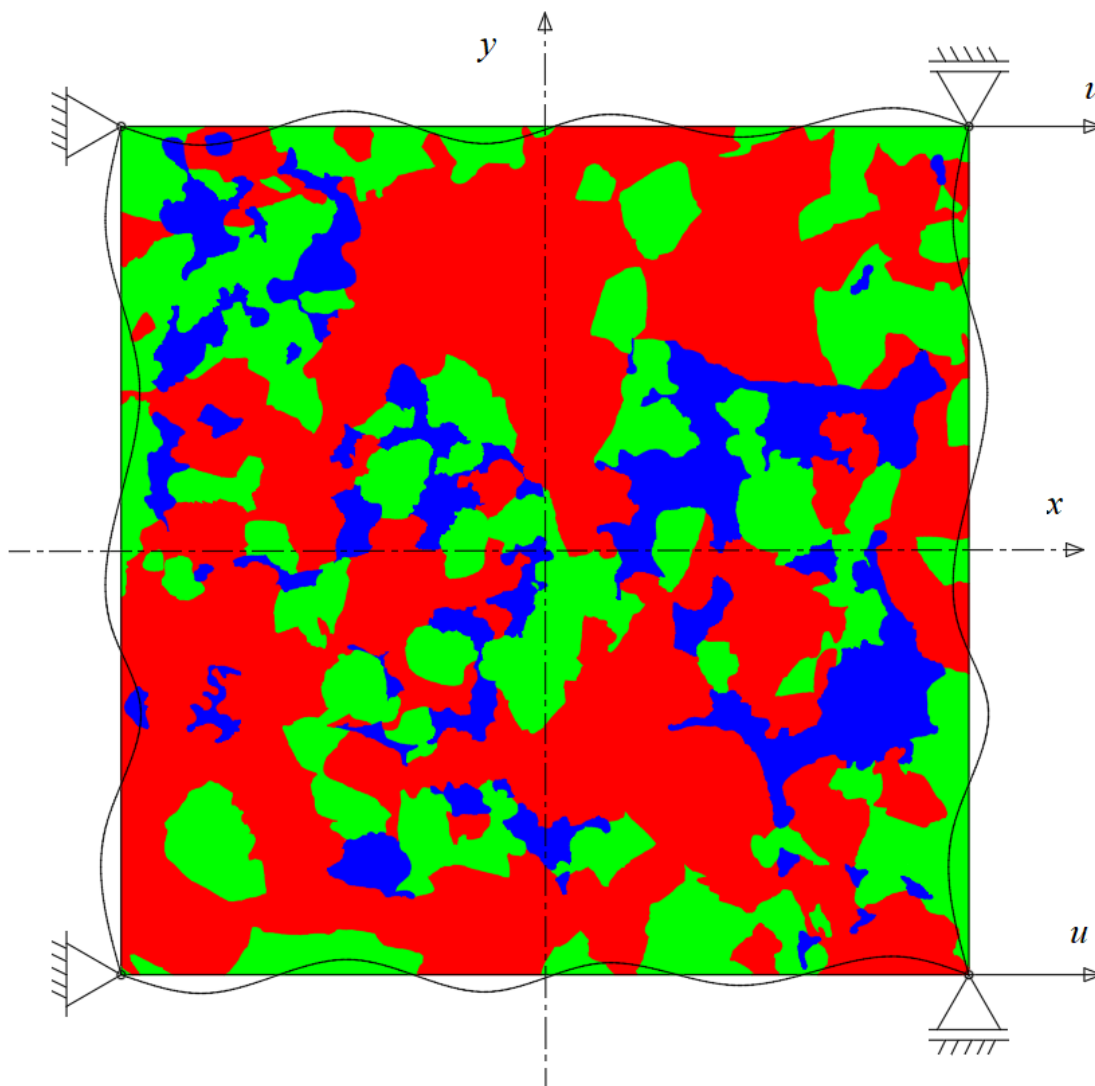
$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{R}, \quad (6.1)$$

gdje je \mathbf{K} matrica krutosti proračunskog modela, \mathbf{V} globalni vektor čvornih pomaka, i \mathbf{R} globalni vektor čvornih sila, a dimenzije tih veličina ovise o ukupnom broju stupnjeva slobode proračunskog modela. Za proračunski model s jednim osnovnim 2D kvadratnim elementom (slika 20), koji je definiran pomoću četiri čvora, od kojih svaki ima po dva stupnja slobode, izraz (6.1) u suštini predstavlja sustav od $4 \times 2 = 8$ jednadžbi s 8 nepoznanica. Jasno je da će se povećanjem broja elemenata povećavati broj stupnjeva slobode, a tako i broj jednadžbi koje se moraju rješavati. Zato za prosječnu fino diskretiziranu proračunsku domenu treba imati na raspolaganju ozbiljne računalne i vremenske resurse. Pogrubljenjem mreže može se značajno smanjiti potreba za tim resursima, što će se i pokazati na praktičnom primjeru u ovom poglavlju. U praksi se najčešće teži postizanju kompromisa variranjem gustoće mreže i tolerancije pogreške rješenja. Postupak traženja takvog kompromisa obično se naziva analiza osjetljivosti

Tablica 3: Broj KE za različite gustoće mreže

RVE	1	2	3	4
<code>resizeFactor = 1</code>	717074	716339	694405	743938
<code>resizeFactor = 0,75</code>	402833	402904	390692	417939
<code>resizeFactor = 0,5</code>	178310	177792	172366	184994

mreže (eng. *Mesh Sensitivity Analysis*), odnosno analiza osjetljivosti rješenja analize na gustoću mreže. Za potrebe ovog rada provedena je upravo takva analiza, za sve četiri mikrostrukturne sheme. U MATLAB kodu namijenjenom za generiranje mreže implementirana je varijabla `resizeFactor` kojoj se dodjeljuje vrijednost "rezolucije" geometrijske mreže. Ako joj je pridružena vrijednost 1, mreža će se generirati na način da jedan piksel odgovara točno jednom konačnom elementu. To znači sljedeće: ako je rezolucija slike 940×940 piksela, što je u prosjeku stvarni slučaj kod shema korištenih u ovom radu, tada će broj konačnih elemenata biti upravo 940^2 , umanjeno za broj piksela koji spadaju u područje pora. Varijabli `resizeFactor` moguće je i pridružiti vrijednosti manje od 1, što znači da će konačni elementi biti određeni broj puta veći od veličine piksela, a mreža će biti grublja. Odabrane su vrijednosti 1, 0,75 i 0,5, što znači da se osim mreže u kojoj jedan konačan element odgovara točno jednom pikselu (100% rezolucija), koriste i mreža s 75% odnosno 50% manjom rezolucijom prostorne diskretizacije. Za prostornu diskretizaciju korišteni su isključivo osnovni pravokutni elementi (u ovom posebnom slučaju kvadratni) s osam stupnjeva slobode, poput onoga prikazanog na slici 20. U tablici 3 prikazan je broj elemenata za sve tri vrijednosti `resizeFactor`-a s kojima su generirane mreže konačnih elemenata (KE), za sva tri reprezentativna volumenska elementa (RVE). Koristeći jedan, u ovoj fazi projekta arbitran, skup materijalnih parametra mikrokonstituenata, za svaku mikrostrukturu provedene su tri numeričke simulacije, s finom, srednje gustom i grubom mrežom. Te su simulacije, kao i sve ostale u okviru ovog diplomskog rada, napravljene uz pomoć komercijalnog programskog paketa Abaqus, na radnoj stanici u vlasništvu Katedre za mehaniku i čvrstoću. Proračun je definiran u Abaqus input datoteci koja je generirana pomoću posebne Python skripte i tekstualnih datoteka koje sadrže informacije o koordinatama čvorova i njihovoj pripadnosti određenim fazama, kao i informacijama o identitetu konačnih elemenata na rubu. Na RVE-u su definirani periodični rubni uvjeti, prema slici 21. Periodični rubni uvjeti definiraju se egzaktno samo u četiri vršna čvora RVE-a, dok su za sve ostale rubne čvorove pomaci u sprezi s njima nasuprotnim čvorom, tj. definirani su relativno. Na slici 21 može se vidjeti



Slika 21: Periodični rubni uvjeti

da niti na jednoj granici nije strogo definirano polje pomaka (valovite crne linije). Primjenom periodičnih rubnih uvjeta postiže se veća fleksibilnost granice proračunske mreže nego da je svim čvorovima na određenoj granici propisan egzaktan pomak (eng. *displacement boundary condition* ili *traction boundary condition*). Pomaci u desnim vršnim čvorovima definirani su u Abaqus input datoteci na takav način da homogenizirana deformacija na kraju iznosi 2%; to je vrijednost koja je preuzeta s makroskopskog nivoa (u skladu sa statičkim vlačnim pokusom iz [12]). Simulacije su provedene inkrementalno, bez fiksnog inkrementa. Za rješavanje analize na najgušćoj mreži numeričkom rješavaču trebalo je oko dva sata, za srednje gustu mrežu oko sat vremena, a za najgrublju manje od pola sata. Rješenja dobivena Abaqusom homogenizirana su koristeći Python skriptu u kojoj je programirana jednačba (5.5), samo što se ovdje radi o dvodimenzionalnim elementima, odnosno o plošnoj domeni ukupne površine A , tako da se (5.5)

pretvara u

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{A} \int_A \sigma_{ij} dA. \quad (6.2)$$

Veoma je jednostavno diskretizirati taj izraz na RVE-u. Ako se integral pretvori u sumu, a infinitezimalna površina dA u površinu jednog konačnog elementa koji diskretizira RVE, vrijedi da je

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^{n_{el}} \sigma_{ij}^i A^i, \quad (6.3)$$

pri čemu je n_{el} ukupan broj konačnih elemenata (ovisno o RVE-u i `resizeFactor`-u, prema tablici 3). Budući da se konačni elementi za diskretizaciju dobivaju binarizacijom slike, svaki element ima površinu jednog piksela kad je `resizeFactor`= 1, odnosno nešto veću kad je riječ o grubljim mrežama. Time je ukupna površina jednostavno površina jednog elementa pomnožena s brojem elemenata, $A = A^1 \cdot n_{el}$. Raspisivanjem sume dobije se da je

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{\sigma_{ij}^1 \cdot A^1 + \sigma_{ij}^2 \cdot A^2 + \sigma_{ij}^3 \cdot A^3 + \dots + \sigma_{ij}^{n_{el}} \cdot A^{n_{el}}}{A^1 \cdot n_{el}}, \quad (6.4)$$

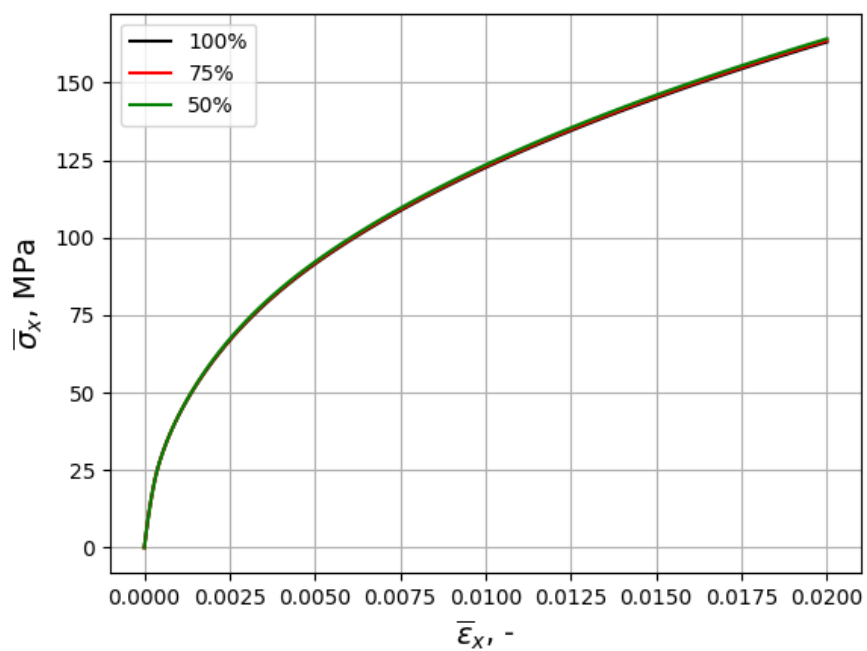
a s obzirom da su sve površine A^i jednake za svaki konačni element i , površine u brojniku mogu se izlučiti i pokratiti s površinom u nazivniku te se dolazi do konačnog jednostavnog izraza za homogenizirano naprezanje RVE-a,

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{el}} \sigma_{ij}^i}{n_{el}}, \quad (6.5)$$

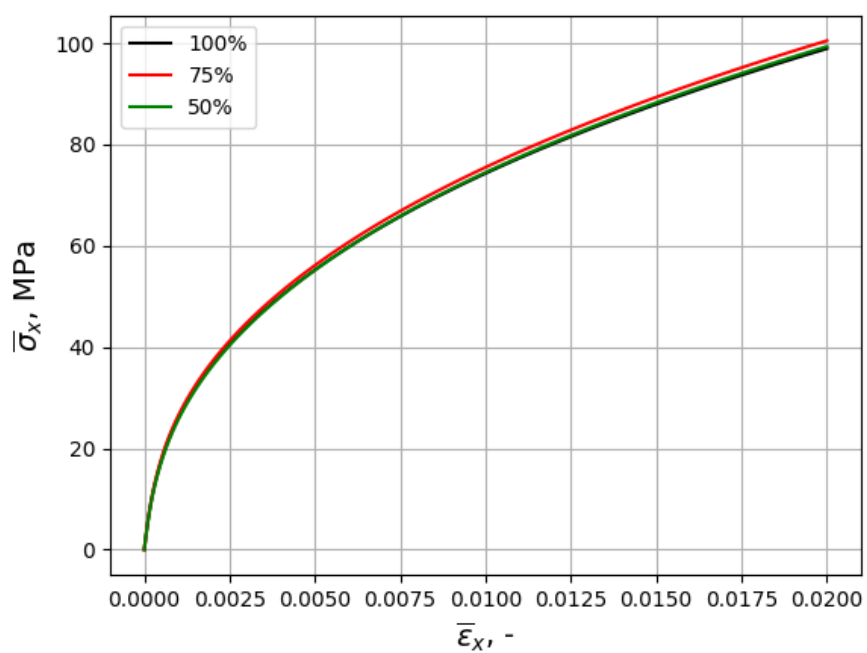
koji je programiran u Python skripti. Homogenizirana naprezanja koja su dobivena obradom podataka riješenih proračuna na netom opisani način prikazana su $\sigma - \varepsilon$ dijagramima za svaki od četiri RVE-a na slikama 22, 23, 24 i 25. Postoci u legendi predstavljaju vrijednosti `resizeFactor`-a. Podaci o homogenom naprezanju su upareni s odgovarajućom inkrementacijom deformacije u intervalu od nule do 2%. Budući da se radi o simulaciji RVE-a koji je dio epruvete u jednoosnom vlačnom testu, homogenizirani Cauchyjev tenzor naprezanja zamjenjuje se jedinom komponentom različitom od nule, koja je u ovom slučaju $\bar{\sigma}_{11}$, odnosno u simboličkom zapisu $\bar{\sigma}_x$, kako se može vidjeti iz izraza (6.6).

$$\bar{\sigma}_{ij} = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{11} & \bar{\sigma}_{12} & \bar{\sigma}_{13} \\ \bar{\sigma}_{21} & \bar{\sigma}_{22} & \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} & \bar{\sigma}_{32} & \bar{\sigma}_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

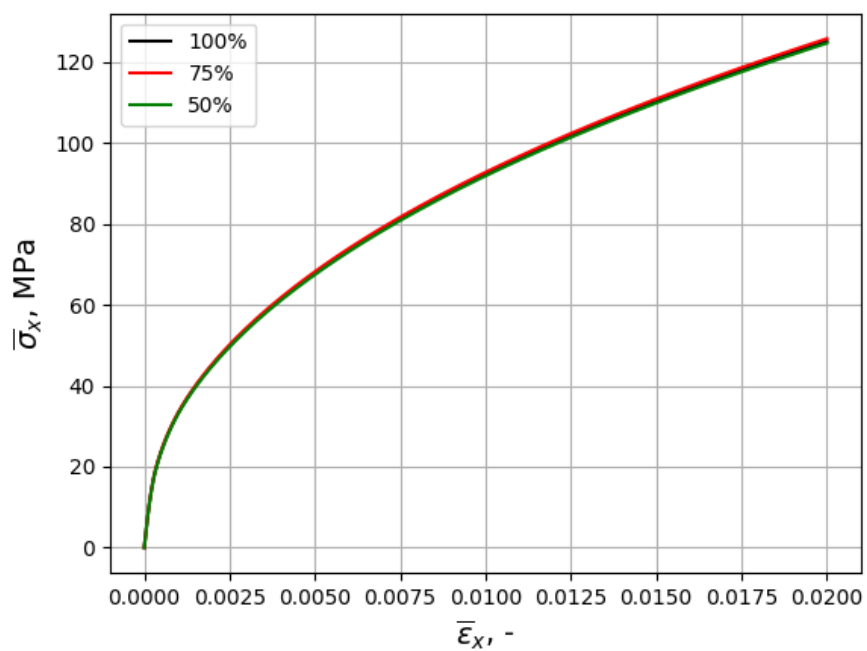
Iz prikazanih dijagrama lako je uočiti izrazitu bliskost rješenja za mreže različitih gustoća diskretizacije. Zahvaljujući očigledno visokoj neovisnosti proračuna o gustoći mreže donesena je odluka da se cijeli daljnji proračun radi na najgrubljoj mreži, s `resizeFactor`-om 50%, odnosno s konačnim elementima duplo većim od piksela originalne slike.



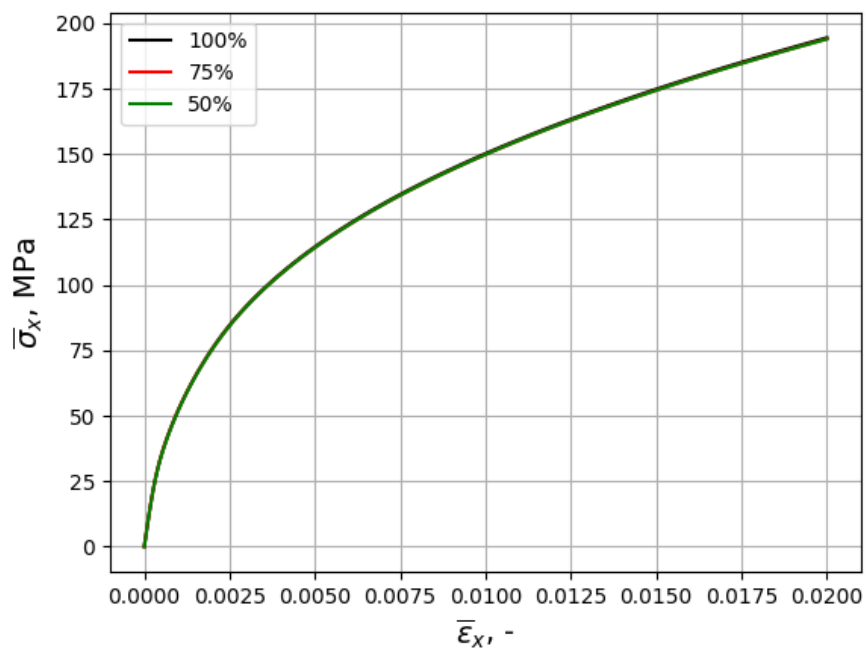
Slika 22: Osjetljivost prvog RVE-a



Slika 23: Osjetljivost drugog RVE-a



Slika 24: Osjetljivost trećeg RVE-a



Slika 25: Osjetljivost četvrtog RVE-a

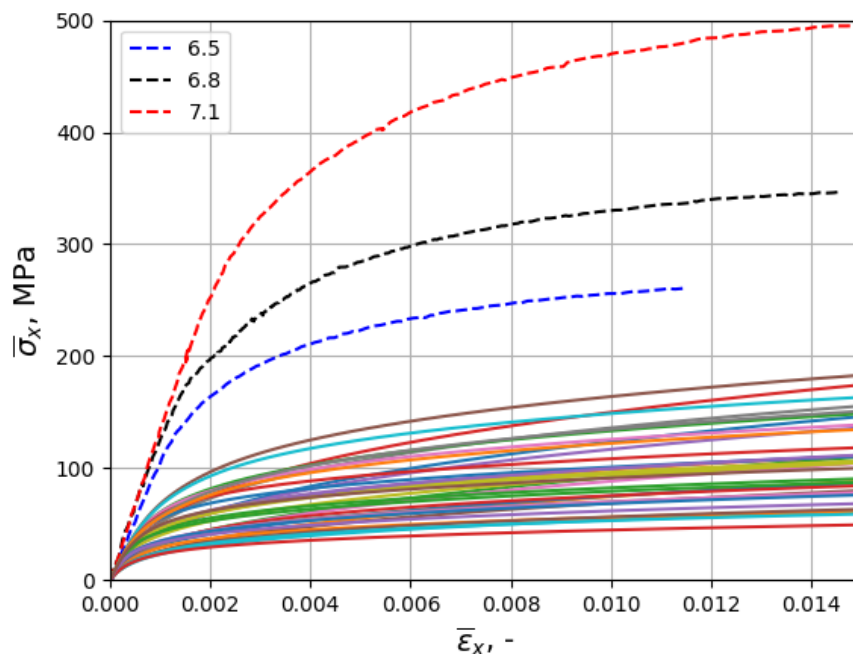
6.3 Permutacija materijalnih parametara

Cilj ovog rada jest pronalazak podudarnosti rezultata numeričke simulacije na mikrorazini s eksperimentalnim podacima dobivenim jednoosnim vlačnim testom na epruvetama sinteriranog čelika. Pretpostavlja se da je moguće usuglasiti podatke dobivene eksperimentom na makrorazini s podacima koji proizlaze iz računalne homogenizacije rješenja problema rubnih vrijednosti na RVE-ovima, na mikrorazini. Ideja je ispitati konstitutivno ponašanje RVE-a koristeći sve moguće kombinacije eksperimentalno određenih mehaničkih svojstava mikrokonstituenta, iz tablice 2. To znači da će se svakoj vrijednosti za jednu fazu, recimo ferit, pridružiti tri vrijednosti za bainit, i obrnuto. Potrebno je napraviti iscrpnu permutaciju materijalnih parametara.¹ Skupovi podataka razvrstani su u dvije kategorije, po materijalnim fazama (ferit i bainit), a za svaku od tih dviju faza poznati su elastoplastični materijalni parametri dobiveni trima metodama rekonstrukcije konstitutivnih krivulja. Takva struktura permutira se u ukupno $3^2 = 9$ kombinacija. Svaka od tih devet kombinacija predstavlja poseban skup podataka koji se unosi u Abaqus input datoteku. Budući da su sve tri metode suglasne u određivanju modula elastičnosti E , koji za ferit iznosi 186 GPa, a za bainit 239 GPa, taj parametar za materijalne faze ostaje nepromijenjen u svim analizama. S obzirom da je u ovom radu korišeno ukupno četiri RVE-a, svaka od 9 kombinacija mora se proračunavati četiri puta, što znači da je ukupan broj simulacija koje se provode jednak $9 \times 4 = 36$. Podaci o plastičnosti generirani su uz pomoć Python skripte, koristeći *power-law* model očvršćenja, koji je korišten i u [12]. Uzimajući u obzir izraze (4.4) i (5.8), ukupna deformacija može se zapisati kao

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \left(\frac{\sigma}{K}\right)^{\frac{1}{n}}, \quad (6.7)$$

a upravo je ta jednadžba korištena u skripti za generiranje podataka o plastičnom ponašanju. Po završetku svih 36 analiza u Abaqusu, dobivena polja naprezanja homogenizirana su Python skriptom prema izrazu (6.5). Podaci o homogeniziranom naprezanju i deformaciji evaluirani su grafički pomoću dijagrama koji je prikazan na slici 26, a koji ne ukazuje na veći uspjeh u metodi modeliranja od onoga koji je opisan u [12], vidjeti dijagram na slici 15. Ovakvo razilaženje eksperimenta i numerike indikator je pogrešnog pristupa modeliranju problema. Međutim, u ovom slučaju već je u radu [12] dovedena u pitanje sama točnost eksperimenta. Naime, pretpostavlja se da prilikom rješavanja problema rubnih vrijednosti dolazi do nefizikalno visokog

¹Cilj je izaći iz okvira jedne metode rekonstrukcije $\sigma - \varepsilon$ krivulja (Giannakopoulos, Giannakopoulos FS, Dao) po proračunu, već se dodatno isprobavaju kombinacije podataka iz dvaju različitih metoda u jednom proračunu.



Slika 26: Usporedba makroskopskih podataka i RVE analize

lokaliziranog plastičnog toka u feritnoj materijalnoj fazi zbog korištenja neprecizno izmjenjenih vrijednosti njezinih plastičnih svojstava. Skup krivulja indentacije feritne faze u [12] pokazuje značajno rasipanje rezultata od mjerenja do mjerenja, što bi se moglo objasniti utjecajem tvrde bainitne faze na indentacijski odziv ferita. Moguće je da je riječ o efektu koji se javlja kad se indentacijom određuje odziv bilo kakve mekane matrice s tvrdim uključinama, što je također spomenuto u [12]. Zaključak je da s vrijednostima mehaničkih svojstava mikrokonstituenata iz [12], dobivenim nanoindentacijom, nije moguće dobro opisati makroskopski odziv sinteriranog čelika, vjerojatno zbog prevelike pogreške prilikom uprosječavanja krivulja indentacije individualnih mikrostrukturnih faza.

6.4 Homogenizacija metalne matrice

Postoji pristup kojim se može opisati prosječno konstitutivno ponašanje RVE-a bez da se u obzir uzimaju eksperimentalni podaci upitne valjanosti. Koristeći podatke iz jednoosnog vlačnog testa, koji opisuju konstitutivno ponašanje na makrorazini (tablica 1), može se postaviti problem u kojem treba pronaći vrijednost nekog konstitutivnog parametra metalne matrice RVE-a (bainitna i feritna faza skupa, bez pora). Takav parametar homogene metalne matrice mora zadovoljavati jedno svojstvo, a to je da se njegovim uključanjem u proračun na razini mikrostruk-

ture dobiva homogenizirana vrijednost jednaka eksperimentalnoj makroskopskoj vrijednosti tog parametra. Takav je pristup svakako poprilično pojednostavljen jer ne uzima u obzir heterogenost metalne matrice, koja je u stvarnosti sastavljena od dvije faze, od kojih jedna (bainit) čak niti nije faza već je zasebna mikrostruktura, sastavljena od karbida Fe_3C i ferita. Također, između svih tih mikrostrukturnih faza tijekom deformiranja odvijaju se izrazito kompleksni procesi na granicama zrna. Međutim, s obzirom na uspjeh eksperimentalnog pandana ovom pristupu², koji je opisan na kraju [12], a isto tako i na nepreciznost postupka identifikacije mehaničkih svojstava zasebnih faza, smatra se da je ovaj postupak razumna alternativa. Kako bi se pobliže objasnio mogući postupak, koji u ovom radu nije u potpunosti proveden zbog vremenskog ograničenja, koristit će se matematička notacija. Ako se koristi općenita forma Ramberg-Osgoodovog modela očvršćenja,

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \alpha \cdot \frac{\sigma}{E} \left(\frac{\sigma}{\sigma_y^0} \right)^{n-1}, \quad (6.8)$$

može se vidjeti da postoji više ključnih parametara koji opisuju konstitutivno ponašanje u elastičnom i elastoplastičnom području. U elastičnom području materijal se ponaša u skladu s Hookeovim zakonom, a konstitutivna relacija opisana je isključivo modulom elastičnosti E . S druge strane, konstitutivno ponašanje u elastoplastičnom području određuju tri parametra, a to su σ_y^0 , α i n . Ove se konstitutivne relacije mogu postaviti na mikrorazini, a isto tako i na makrorazini. Stoga će se u svrhu ovog objašnjenja konstitutivna relacija na mikrorazini pisati kao (6.8), a konstitutivni parametri na makrorazini bit će označeni na isti način na koji su u prethodnim poglavljima označavane homogenizirane veličine. Tako su konstitutivni parametri na makrorazini: $\bar{\sigma}_y^0$, $\bar{\alpha}$ i \bar{n} . Postupak će biti opisan za sinter-čelik gustoće $6,5 \text{ g cm}^{-3}$. Makroskopski konstitutivni parametri dobiveni jednoosnim vlačnim testom prikazani su u tablici 1, iz koje je ovdje radi preglednosti izdvojen red vezan uz sinter-čelik gustoće $6,5 \text{ g cm}^{-3}$ (tablica 4). Najprije je potrebno odrediti modul elastičnosti homogene metalne matrice. On se može odre-

Tablica 4: Makroskopski eksperimentalni podaci za uzorak gustoće $6,5 \text{ g/cm}^3$

Modul elastičnosti, GPa	Granica tečenja, MPa	Vlačna čvrstoća, MPa
98,2	218,9	269,8

diti pomoću dva pristupa: implicitnog ili eksplicitnog. Ako se bira implicitni pristup, potrebno

²Ondje se nanoindentacijom po nasumičnim mjestima u mikrostrukturnoj matrici snimaju krivulje indentacije, te se iz prosječne krivulje rekonstruira $\sigma - \varepsilon$ dijagram.

je odrediti funkciju koja opisuje promjenu makroskopskog modula elastičnosti \bar{E} u ovisnosti o modulu elastičnosti metalne matrice E , odnosno funkciju

$$\bar{E} = \bar{E}(E). \quad (6.9)$$

Postupak kojim se dolazi do takve funkcije je sljedeći:

(1) Određuje se deformacija do koje se može provoditi analiza, a da pritom materijal ne uđe u plastično područje. Cilj je promatrati samo elastičan dio konstitutivne krivulje, jer će se za određivanje makroskopskog modula elastičnosti trebati koristiti Hookeov zakon.

(2) Određuje se prva rubna vrijednost intervala u kojem će se nalaziti modul elastičnosti metalne matrice E . Kod ovog je koraka bitno znati da E može biti znatno veći od makroskopskog modula \bar{E} , jer zbog utjecaja pora prava elastičnost metalne matrice ne dolazi do izražaja na makrorazini (da materijal nije porozan homogenizirani modul elastičnosti bio bi jednak modulu elastičnosti metalne matrice). Rubne se vrijednosti određuju tako što se u Abaqus input datoteci postavlja neka vrijednost modula elastičnosti, E_1 , te se s njom provodi analiza u elastičnom području. Budući da je elastično područje linearno, problem se rješava u jednom inkrementu, odnosno direktno. Dobiveno se rješenje homogenizira već opisanim postupkom, preko izraza (6.5) te se dolazi do vrijednosti homogeniziranog naprezanja $\bar{\sigma}_x$. Pomoću homogeniziranog naprezanja i uz neku deformaciju $\bar{\epsilon}_x$ koja je zadana ograničenjem na elastično područje, određuje se koliko iznosi homogenizirani modul elastičnosti po uzoru na izraz (5.7), koji u posebnom slučaju, za RVE na epruveti osno opterećenoj u smjeru x , glasi:

$$\bar{E}_1 = \frac{\bar{\sigma}_x}{\bar{\epsilon}_x}. \quad (6.10)$$

Ako se pokaže da je homogenizirani modul elastičnosti za metalnu matricu modula E_1 , \bar{E}_1 , veći od homogeniziranog modula iz eksperimenta, \bar{E} , odnosno vrijedi

$$\bar{E}_1 > \bar{E},$$

tada se E_1 proglašava gornjom granicom intervala.

(3) Traži se druga granica intervala. Ako je, kao na primjeru iz prošle točke, već određena gornja granica, sad se traži E_2 za kojeg vrijedi $\bar{E}_2 < \bar{E}$. Jednom kad je pronađen, definiran je interval $[E_2, E_1]$ u kojem se nalazi traženi modul metalne matrice.

(4) Određivanje unutarnjih vrijednosti. Sad se može sa sigurnošću odrediti nekoliko točaka unutar intervala $[E_2, E_1]$ kako bi se prikupilo dovoljno podataka za određivanje funkcije. Provodi

se proizvoljan broj proračuna s vrijednostima modula elastičnosti metalne matrice E_i za koje vrijedi nejednakost

$$E_2 < E_i < E_1. \quad (6.11)$$

(5) Određivanje funkcije. Kroz dobivene točke u \bar{E}, E -ravnini numerički se provlači krivulja proizvoljnog stupnja, koja je opisana potpunim polinomom odgovarajućeg stupnja. Za krivulju n -tog stupnja, gdje je $n \in \mathbb{N}$, potpuni polinom koji povezuje elastični modul metalne matrice i odgovarajući homogenizirani modul glasi:

$$\bar{E}(E) = a_0 + a_1E + a_2E^2 + \dots + a_nE^n = \sum_{k=0}^n a_kE^k. \quad (6.12)$$

(6) Određivanje traženog modula elastičnosti metalne matrice. Za primjer uzorka sinteriranog čelika gustoće $6,5 \text{ g/cm}^3$, kod kojeg je $\bar{E} = 98,2 \text{ GPa}$, rješava se jednadžba

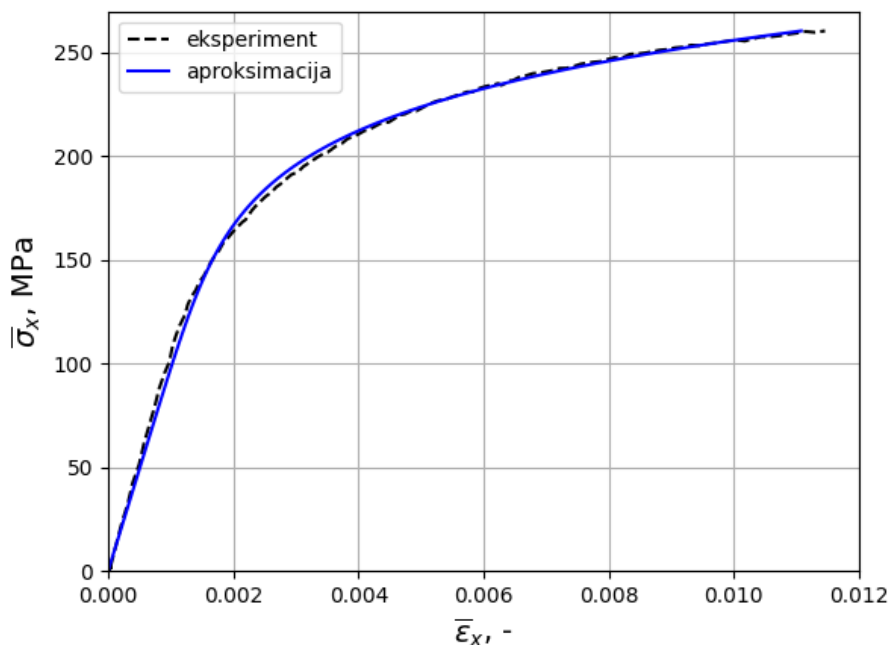
$$98,2 = \sum_{k=0}^n a_kE^k \quad (6.13)$$

Čije rješenje je E^k . Izraz (6.13) vrijedi za svaki polinom stupnja n . Što je n veći, to je manja greška.

Kao što je rečeno, drugi pristup kojim se može odrediti modul elastičnosti metalne matrice je eksplicitni pristup. Takav pristup podrazumijeva "pogađanje" rješenja, odnosno ručno približavanje točnoj traženoj vrijednosti modula metalne matrice E . Za neku proizvoljno odabranu vrijednost modula elastičnosti metalne matrice, E_1 , provodi se proračun te se na isti način kao i kod implicitne metode (6.10) određuje homogenizirani modul elastičnosti. Nakon toga se postupak ponavlja s nekom drugom vrijednosti i promatra se razlika u homogeniziranom modulu dobivenom s dva modula metalne matrice. Ukoliko se vrijednosti približavaju, nastavlja se u tom smjeru. Takav je pristup kod računanja elastičnih parametara mnogo jednostavniji nego implicitni, ali to je uvelike zbog toga što se radi o linearnom problemu pa se proračuni završavaju u manje od jedne minute. Da se za svako "pogađanje" mora čekati dva sata, javila bi se potreba za organiziranim pristupom, poput opisanog implicitnog. Za primjer, na jednom RVE-u u sklopu ovog rada eksplicitnom je metodom dobiven iznos modula elastičnosti metalne matrice $E = 245,2 \text{ GPa}$, što je u odnosu na makroskopskih $\bar{E} = 98,2 \text{ GPa}$ smanjenje modula elastičnosti u iznosu od

$$1 - \frac{98,2}{245,2} = 0,5995, \quad (6.14)$$

odnosno 60% iznosa modula elastičnosti gubi se pri prelasku s mikro- na makrorazinu i to isključivo zbog utjecaja volumenskog udjela pora.



Slika 27: Numerička aproksimacija makroskopske eksperimentalne krivulje za gustoću 6,5 g/cm³

Opis implicitnog pristupa kod određivanja elastičnih parametara služio je samo kao uvod u određivanje plastičnih parametara, gdje će biti od puno veće koristi. To je zato što se plastično ponašanje proračunava inkrementalnim metodama i zato što ga opisuje veći broj parametara, u Ramberg-Osgoodovom modelu čak tri. Jedan od ta tri parametra, granica tečenja, poznat je iz eksperimenta (tablica 4). Preostala dva potrebno je odrediti numeričkim putem iz krivulja jednoosnog vlačnog testa, slika 11. Numeričkom aproksimacijom krivulje konstitutivnog ponašanja (slika 27), u Pythonu uz pomoć funkcije `curve_fit` koja je dio paketa SciPy, za uzorak gustoće 6,5 g/cm³ dobivaju se preostala dva makroskopska parametra, tako da vrijedi

$$\bar{\sigma}_{y0} = 218,9\text{MPa}; \quad \bar{\alpha} = 1,033125; \quad \bar{n} = 7,447641. \quad (6.15)$$

Sada je od velike koristi objašnjenje implicitne metode kod određivanja modula elastičnosti, jer se isti princip primjenjuje kod određivanja plastičnih parametara. Jedino je situacija zamršenija jer se radi o tri varijable, što znači da je cilj dobiti funkcije ovisnosti svih homogeniziranih parametara o parametrima dodijeljenim metalnoj matrici, kao što je prikazano u izrazima (6.16),

(6.17) i (6.18).

$$\bar{\sigma}_{y0} = \bar{\sigma}_{y0}(\sigma_y^0, \alpha, n) \quad (6.16)$$

$$\bar{\alpha} = \bar{\alpha}(\sigma_y^0, \alpha, n) \quad (6.17)$$

$$\bar{n} = \bar{n}(\sigma_y^0, \alpha, n) \quad (6.18)$$

Kako bi se ove funkcije odredile, prvo se, kao i kod elastičnog postupka, za svaki parametar treba odrediti dvije vrijednosti pridružene metalnoj matrici s kojima se, nakon provođenja proračuna, dobivaju homogenizirane vrijednosti koje definiraju interval u kojem se nalazi odgovarajuća eksperimentalna vrijednost. Ako su, kao u primjeru za elastično područje, granične vrijednosti materijalnih parametara označene indeksima 1 odnosno 2, moraju vrijediti relacije

$$\bar{\sigma}_{y0} \in \langle \bar{\sigma}_{y0,1}, \bar{\sigma}_{y0,2} \rangle; \quad (6.19)$$

$$\bar{\alpha} \in \langle \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2 \rangle; \quad (6.20)$$

$$\bar{n} \in \langle \bar{n}_1, \bar{n}_2 \rangle; \quad (6.21)$$

ako je indeksom 1 označena donja granica intervala, a indeksom 2 gornja. Zatim je unutar tog intervala potrebno generirati skup podataka dovoljno velik da omogućava kvalitetnu aproksimaciju funkcija (6.16)-(6.18). Preporučljivo je odabrati dvije vrijednosti unutar granica intervala 6.19-6.21 za zadovoljavajuću preciznost. Za slučaj dvije unutarnje vrijednosti, odnosno s rubnima ukupno četiri vrijednosti, za svaki se materijalni parametar, od njih ukupno tri, generiraju permutirane kombinacije intervalnih vrijednosti. S obzirom da se radi o četiri intervalne vrijednosti koje se permutiraju nad tri materijalne varijable, ukupan broj kombinacija jednak je 4^3 , odnosno 64. Za svaku od tih 64 kombinacije potrebno je napraviti proračun u Abaqus-u. To je računalno zahtjevan zadatak, osobito ako se provodi paralelno, jer se svaki proračun rješava iterativno, a poželjno je da ima dovoljno inkremenata kako bi se osigurala preciznost. Nakon što se za svaki od provedenih 64 proračuna obavi računalna homogenizacija i formira skup podataka $\bar{\sigma}_x - \bar{\epsilon}_x$, analogno postupku opisanom za određivanje elastičnog modula sada se pronalazi polinom koji najbolje opisuje dobiveni parametarski prostor. Budući da su (6.16)-(6.18) funkcije triju varijabli, one će biti opisane potpunim polinomima. Za primjer neke skalarne funkcije triju varijabli $f = f(x, y, z)$, polinom p koji aproksimira vrijednost funkcije f u točki $T(x, y, z)$ glasi

$$p = a_0 + a_1x + a_2y + a_3z + a_4x^2 + a_5y^2 + a_6z^2 + \\ a_7xy + a_8yz + a_9xz + a_{10}x^3 + a_{11}y^3 + a_{12}z^3 + \dots$$

i po pravilu Pascalovog trokuta razvija se u beskonačnost. Zato je potrebno odabrati željeni stupanj aproksimacije, koji njegov razvoj ograničava na određeni broj članova, tako da npr. potpuni polinom drugog stupnja za aproksimaciju funkcije triju varijabli glasi

$$p_{(2)} = a_0 + a_1x + a_2y + a_3z + a_4x^2 + a_5y^2 + a_6z^2 + a_7xy + a_8yz + a_9xz.$$

Numeričkim rješavanjem sustava jednažbi

$$218,9 = \bar{\sigma}_{y0}(\sigma_y^0, \alpha, n); \quad (6.22)$$

$$1,033125 = \bar{\alpha}(\sigma_y^0, \alpha, n); \quad (6.23)$$

$$7,447641 = \bar{n}(\sigma_y^0, \alpha, n); \quad (6.24)$$

gdje su funkcije opisane potpunim polinomima proizvoljnog stupnja, dolazi se do uređenog skupa tražnih materijalnih parametara homogene metalne matrice (σ_{y0}, α, n) , koji zadovoljavaju jednažbe (6.22)-(6.24).

7. Zaključak

Znanost o materijalima tehničke materijale promatra na više razina:

- makrostrukturalna;
- mikrostrukturalna;
- nanostrukturalna;
- atomska;

od kojih je industrijski najzanimljivija upravo mikrostrukturalna jer njezina svojstva direktno određuju svojstva materijala na makrorazini. Ta se povezanost kod metalnih materijala vrlo dobro poznaje iz aspekta termodinamike te se pomoću faznih dijagrama s velikom točnošću određuje kakav treba biti proces proizvodnje i obrade metala da bi se dobila određena mikrostrukturalna, a samim time i određena svojstva na makrorazini. Najpopularniji metalni materijal je čelik, čija primjena seže u sve sfere ljudskog djelovanja. Zbog sve većih zahtjeva u industrijskim sferama, stalno se traže načini za poboljšanje svojstava čelika razvojem novih metoda proizvodnje i obrade. Jedna od recentnijih tehnologija u primjeni kod proizvodnje čelika jest metalurgija praha. Temeljni koraci proizvodnog procesa tehnologijom metalurgije praha su:

1. proizvodnja praha;
2. kompaktiranje;
3. sinteriranje;
4. završna obrada.

Budući da se tijekom procesa sinteriranja kompaktirani metalni prah zagrijava na temperaturu ispod temperature taljenja, između sitnih čestica praha kreću se stvarati veze, ali prazan prostor između njih ne ispunjava se u potpunosti, već se pretvara u pore. Posljedica toga jest da su sinterirani čelici na mikrostrukturnoj razini porozni, što im pruža određene prednosti u odnosu na čelike proizvedene klasičnim proizvodnim tehnologijama. Jedna od ključnih prednosti je prigušenje vibracija, što znači i smanjenje buke u pogonu konstrukcijskih dijelova od sinteriranog čelika. Velike prednosti očituju se i u samoj tehnologiji proizvodnje, budući da koncept oblikovanja kompaktiranjem metalnog praha podrazumijeva mogućnost izrade strojnih dijelova

izrazito kompleksne geometrije s relativno visokom iskoristivošću sirovine. Jedno od glavnih negativnih svojstava materijala s poroznom mikrostrukturom, a time i sinteriranog čelika, jest sklonost koncentraciji naprezanja na rubovima pora. Zbog tog negativnog svojstva sinteriranog čelika izrazito je bitno u mehaničke analize uključiti podatke o njegovoj mikrostrukтури. U te svrhe koriste se višerazinske metode.

Kao što sam naziv govori, cilj višerazinskih metoda jest povezati fizikalne modele s više razina u jedan koherentni sustav. Najpopularnija klasa višerazinskih metoda jesu konkurentne metode, kojima se simultano provode proračuni na mikrorazini i makrorazini, te se konstitutivne relacije prenose direktno s jedne razine na drugu. Postoje i hijerarhijske metode, koje karakterizira ulančana sprega rješavača, što znači da se prvo rješava jedna razina, a takvo se rješenje zatim prenosi na drugu. Klasi hijerarhijskih metoda pripada i računalna homogenizacija, koja je korištena u ovom radu. Ideja računalne homogenizacije jest da se neka varijabla s makrorazine prenosi na mikrorazinu, a zatim se na mikrorazini na reprezentativnom elementu mikrostrukture (RVE-u) koji je diskretiziran konačnim elementima, rješava problem rubnih vrijednosti. Rješenje dobiveno na mikrorazini tad se transformira (homogenizira) i vraća na makrorazinu. Kako bi se problemi višerazinskih metoda mogli obuhvatiti numeričkim proračunom, nužno je odrediti mehanička svojstva materijalnih faza koje čine mikrostrukтуру. Instrumentiranom indentacijom mehanička svojstva pojedinih materijalnih faza ispituju se mjerenjem dubine prodiranja dijamanatnog indentatora u površinu materijala, u ovisnosti o primijenjenom opterećenju.

U sklopu ovog rada napravljen je niz proračuna metodom računalne homogenizacije prvog reda kako bi se numeričkom simulacijom pokušalo utvrditi validnost materijalnih parametara dobivenih instrumentiranom indentacijom u disertaciji dr. sc. Zorana Tomića [12]. Hipoteza je bila sljedeća: primjenom eksperimentom izmjerenih parametara mikrokonstituenata sinteriranog čelika i homogenizacijom konstitutivnog ponašanja RVE-a trebao bi se dobiti odziv sličan onome koji je dobiven u statičkom vlačnom testu epruvete napravljene od istog materijala. U tu svrhu pripremljene su permutacije mjerenih materijalnih parametara mikrokonstituenata (ferita i bainita), ukupno devet kombinacija. S tih devet kombinacija provedena je računalna homogenizacija na četiri RVE-a, dakle ukupno 36 analiza. Na granicama RVE-a definirani su periodični rubni uvjeti. Konačna makroskopska deformacija preuzeta iz statičkog vlačnog pokusa bila je 2%. Rezultati su pokazali da numerička simulacija na RVE-ovima i dalje značajno odstupa od podataka dobivenih statičkim vlačnim pokusom na makrorazini, čime je utvrđeno da je pristup pogrešan i da je potrebno revidirati metodu ispitivanja mehaničkih svojstava mikrokonstitu-

enata, odnosno računalne homogenizacije prvog reda za slučaj sinteriranog čelika.

U posljednjem je poglavlju predstavljena metoda koja polazi od pretpostavke homogene metalne matrice, kojom se može odrediti prosječan konstitutivni odziv materijalnih faza. Ta metoda zanemaruje razliku između feritne i bainitne faze, ali uzima u obzir utjecaj pora na konstitutivno ponašanje sinteriranog čelika.

Literatura

- [1] Mridha, S. *Metallic Materials // Reference Module in Materials Science and Materials Engineering* (2016)
- [2] <https://www.enciklopedija.hr/clanak/thomsen-christian-jurgensen>, 27.11.2024.
- [3] Spanos, G.; Reynolds, W. T. *Microstructure of Metals and Alloys. // Physical Metallurgy* (Fifth Edition), str. 1073-1112
- [4] Kostadin, T. *Čelici i željezni ljevovi*, Veleučilište u Karlovcu, 2017.
- [5] Ivušić, V.; Franz, M.; Španiček, Đ.; Ćurković, L. *Materijali 1 - Sveučilišni priručnik*, Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2014.
- [6] <https://forum.image.sc/t/segmentation-of-ferritic-bainitic-perlitic-l-martensitic-microstructure-steels/10591>, 22.11.2024.
- [7] https://en.wikipedia.org/wiki/Powder_metallurgy, 28.11.2024.
- [8] Santos da Silva, F.; Cinca, N.; Dosta, S.; Cano, I. G.; Benedetti, A.; Guilemany, J. M. (2017). *Cold gas spray coatings: Basic principles, corrosion protection and applications*. *Eclética Química Journal*. 42.
- [9] Freitas Jr., R. A.; Gilbreath, W. P. *Advanced Automation for Space Missions*, NASA, 1986.
- [10] <https://hr.kfx-machining.com/info/what-is-powder-metallurgy-85944700.html>, 18.11.2024.
- [11] German, R. M. *Thermodynamics of sintering*. *Sintering of Advanced Materials*, 3–32. (2010.)
- [12] Tomić, Z. *Numerical phase-field modelling and experimental validation of sintered steel fracture and fatigue behaviour*. Doktorska disertacija. Zagreb : Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2023.
- [13] <https://hill-engineering.com/general-interest/tensile-test/>, 23.11.2024.

- [14] VanLadingham MR. *Review of Instrumented Indentation* <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC4846235/>, 19.11.2024.
- [15] <https://www.anton-paar.com/corp-en/services-support/document-finder/application-reports/compression-and-stress-strain-characterization-of-powder-particles-for-additive-manufacturing-by-ins/>, 24.11.2024.
- [16] Ee, Weinan; Engquist, Bjorn; Li, Xiantao; Ren, Weiqing; Vanden-Eijnden, Eric. (2007). *Heterogeneous multiscale methods: A review*. // *Communications in Computational Physics*. 2.
- [17] Jurčević, A. *Multiscale Modelling of Damage in Ductile Heterogeneous Materials*. Doktorski rad. Zagreb : Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2024.
- [18] Galvanetto, U.; Ferri Aliabadi, M. H. *Multiscale Modeling in Solid Mechanics - Computational Approaches* // *Computational and Experimental Methods in Structures*. Vol. 3 (2010)
- [19] Lesičar, T. *Multiscale modeling of heterogeneous materials using second-order homogenization (Disertacija)*. Zagreb: Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2015.
- [20] Geers, M. G. D.; Kouznetsova, V. G. ; Brekelmans, W. A. M. *Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges* // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. Vol. 234 (2010), str. 2175-2182
- [21] Alifrević, I. *Uvod u tenzore i mehaniku kontinuuma*, Golden marketing, Zagreb 2003.
- [22] *Metoda konačnih elemenata: Linearna i nelinearna analiza konstrukcija*, Golden marketing, Tehnička knjiga, 2021.