



دانشگاه تهران
دانشکده فنی
دانشکده مهندسی عمران



تحلیل مکانیکی-شیمیایی توسعه ترک بین دانه ای ناشی از شرایط تنش-خوردگی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی عمران - گرایش سازه

نگارنده:

علی عاقلی گوکی

استاد راهنما:

دکتر سهیل محمدی

مهرماه ۱۴۰۴

به نام خدا



دانشگاه تهران
دانشکده فنی
دانشکده مهندسی عمران



تحلیل مکانیکی-شیمیایی توسعه ترک بین دانه ای ناشی از شرایط تنش-خوردگی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی عمران - گرایش سازه

نگارنده:

علی عاقلی گوکی

استاد راهنما:

دکتر سهیل محمدی

مهرماه ۱۴۰۴



به نام خدا

گواهی اصالت اثر

اینجانب علی عاقلی گوکی دانشجوی مقطع کارشناسی ارشد رشته عمران گرایش سازه دانشکده مهندسی عمران دانشگاه تهران گواهی می‌دهم که:

۱- مطالب این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است؛

۲- محتوای این پایان‌نامه پیش از این برای دریافت هیچ مدرکی ارائه نشده است؛

۳- در انجام پژوهش و تهیه این پایان‌نامه، همه موازین اخلاق پژوهش رعایت شده است؛

۴- ارایه هرگونه دستاورد علمی یا صنعتی، همچون انتشار مقاله، چاپ کتاب، ثبت اختراع و مشابه آن،

که برگرفته از این پایان‌نامه باشد، منوط به تایید استاد راهنما، رعایت حقوق مالکیت مادی و

معنوی دانشگاه تهران (مطابق مقررات دانشگاه) و ذکر وابستگی به دانشگاه تهران است.

نام و نام خانوادگی دانشجو: علی عاقلی گوکی

امضاء:

تقدیم به خانواده عزیزم،

که همواره پشتیبان من بوده

و صبورانه مرا در این راه همراهی نمودند.

با سپاس از استاد ارجمندم،

جناب آقای دکتر سهیل محمدی

که در تمام مسیر با صبر و حوصله

من را در انجام این پژوهش راهنمایی نمودند.

با تشکر از دوستان گرامی،

و اعضای محترم آزمایشگاه محاسبات سریع دانشکده مهندسی عمران

که در مراحل انجام این تحقیق از مشورت‌های ایشان استفاده نمودم.

چکیده

ترک خوردگی تنش-خوردگی بین دانه‌ای (IGSCC) یک مکانیسم تخریب مهم در بسیاری از سازه‌های نیروگاه‌ایی است. بر این مبنا، اگرچه پیش‌بینی دقیق طول عمر اجزا برای ایمنی و قابلیت اطمینان عملیاتی ضروری است، اما این امر به دلیل ضعف ضوابط موجود و مدل‌های محاسباتی متداول با مشکل مواجه می‌شود. این مدل‌ها که اغلب غیرهمبسته یا فقط همبسته یک طرفه هستند، نمی‌توانند هم‌افزایی عوامل ذاتی IGSCC را که بصورت یک حلقه بازخورد پویا و دو طرفه است در نظر بگیرند. در این فرآیند، میدان‌های تنش مکانیکی، نفوذ مواد شیمیایی را در امتداد مرزهای دانه‌های (GB) کریستال‌ها تسریع می‌کنند، در حالی که تخریب شیمیایی حاصل به طور همزمان بر شکنندگی ماده می‌افزاید، مقاومت شکست آن را تغییر می‌دهد و پیش‌روی ترک را تسهیل می‌کند.

برای پرداختن به این مشکل حاد، این پایان‌نامه، توسعه، پیاده‌سازی و اعتبارسنجی یک مدل شیمیایی-مکانیکی گذرا و همبسته شده کامل را ارائه می‌دهد. این مدل که در قالب روش المان محدود پیاده‌سازی شده در MATLAB آماده شده است، بصورت صریح این دو حوزه را به هم پیوند می‌دهد. شکست مکانیکی توسط یک مدل ناحیه چسبنده ژو-نیدلمن مدل می‌شود، که در آن خواص مواد به صورت پویا متأثر از غلظت موضعی گونه‌های خورنده می‌باشد. این تخریب با کاهش نه تنها انرژی شکست (استحکام چسبندگی) بلکه با کاهش جداشدگی‌های مشخصه، با کاهش شکل‌پذیری ماده مدل‌سازی می‌شود. همزمان، انتقال شیمیایی از طریق قانون فیک مدل‌سازی می‌شود که با یک عبارت انتشار به کمک تنش، که شار شیمیایی را به گرادینان کشش مکانیکی وابسته می‌کند، بهبود یافته است. از روش انتگرال‌گیری زمانی ضمنی گام عقب‌گرد اوپلر مبتنی بر نیوتن-رافسون، ماهیت گذرا و غیرخطی سیستم مورد بررسی قرار می‌گیرد.

این مدل با موفقیت در برابر داده‌های تجربی نرخ رشد ترک (CGR) برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ و فولاد ضد زنگ آستنیتی در محیط‌های شبیه‌سازی شده رآکتورهای مختلف کالیبره شده است و قدرت پیش‌بینی قوی‌ای را نشان می‌دهد. این مدل پس از کالیبراسیون، وابستگی CGR به هر دو عامل شدت تنش اعمالی و شیمیایی محیط خارجی را بدون نیاز به کالیبراسیون مجدد، به طور دقیق بازتولید می‌کند.

یافته‌های تحقیق، که با تحلیل مقایسه‌ای تصدیق شده‌اند، نشان می‌دهند که غیرفعال کردن عبارت انتشار به کمک تنش، نرخ رشد پیش‌بینی‌شده ترک را به طور مشهودی کاهش می‌دهد و شروع پیش‌روی ترک را به تأخیر می‌اندازد. نتایج کمی نشان می‌دهند که حلقه بازخورد شیمیایی-مکانیکی دو طرفه، مکانیسم اساسی حاکم بر IGSCC است. در نهایت، مدل توسعه یافته یک ابزار محاسباتی قوی و مبتنی بر فیزیک ایجاد می‌کند که پایه و اساس قابل اعتمادتری برای ارزیابی یکپارچگی ساختاری و طول عمر اجزای مهندسی سازه‌های نیروگاه‌ایی در معرض ترک خوردگی تنش-خوردگی بین دانه‌ای ارائه می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: ترک خوردگی تنش-خوردگی بین دانه‌ای، مدل همبسته شیمیایی-مکانیکی، مدل ناحیه چسبنده، انتشار به کمک تنش، نرخ رشد ترک، تحلیل چندفیزیکی.

فهرست مطالب

فصل ۱: مقدمه.....	۳
۱-۱- بیان مسئله.....	۳
۲-۱- اهمیت تحقیق.....	۶
۳-۱- اهداف تحقیق.....	۷
۴-۱- ساختار پایان نامه.....	۸
فصل ۲: پیشینه و مرور ادبیات فنی.....	۱۱
۱-۲- مقدمه.....	۱۱
۲-۲- مکانیک ترک خوردگی تنشی-خوردگی بین دانه‌ای.....	۱۲
۱-۲-۲- ماهیت چندفیزیکی IGSCC.....	۱۲
۲-۲-۲- نقش ویژگی‌های مرزدانه.....	۱۹
۳-۲-۲- مدل اکسیداسیون لغزش.....	۲۱
۴-۲-۲- مدل نرخ کرنش نوک ترک.....	۲۲
۵-۲-۲- مدل شکست محیطی همبسته (CEFM).....	۲۳
۶-۲-۲- مکانیسم تحرک سطحی (SMM).....	۲۴
۷-۲-۲- مکانیسم تردی هیدروژنی (HE).....	۲۵

۲۵	۸-۲-۲- هم‌افزایی ساز و کارها
۲۶	۳-۲- مدل‌سازی ناحیه چسبنده شکستگی
۲۶	۱-۳-۲- محدودیت‌های مکانیک شکست الاستیک خطی (LEFM)
۲۷	۲-۳-۲- مفهوم مدل ناحیه چسبنده (CZM)
۲۸	۳-۳-۲- قانون کشش-جداشدگی (TSL)
۳۲	۴-۲- مدل‌سازی انتقال جرم و انتشار
۳۲	۱-۴-۲- قوانین فیک به عنوان مبنای مدل‌سازی انتشار
۳۳	۲-۴-۲- انتشار به کمک تنش
۳۴	۵-۲- مدل‌های همبسته شیمیایی-مکانیکی در شکستگی
۳۴	۱-۵-۲- نقاط قوت و ضعف رویکردهای مختلف
۳۵	۶-۲- خلاصه و شکاف تحقیقاتی
۳۷	فصل ۳: توسعه فرمول بندی حاکم
۳۷	۱-۳- مقدمه
۳۸	۲-۳- معادلات حاکم
۴۳	۱-۲-۳- آسیب المان‌های چسبنده و شرایط مرزی متحرک انتشار
۴۵	۳-۳- تشکیل دستگاه معادلات به روش اجزا محدود
۴۷	۱-۳-۳- گسسته‌سازی معادله تعادل
۵۳	۲-۳-۳- گسسته‌سازی معادله پایستگی جرم
۵۶	۴-۳-۳- توابع شکل در مختصات طبیعی و انتگرال گیری عددی
۶۰	۴-۳- روش حل گام زمانی

فصل ۴: نتایج مدل سازی و بحث	۶۷
۴-۱- مقدمه	۶۷
۴-۲- صحت سنجی مدل	۶۸
۴-۲-۱- صحت سنجی رفتار مکانیکی	۶۸
۴-۲-۲- صحت سنجی رفتار انتشار	۶۹
۴-۳- کالیبره کردن پارامترهای مدل	۷۱
۴-۳-۱- آلیاژ پایه نیکل در محیط BWR	۷۴
۴-۳-۲- فولاد ضد زنگ در محیط BWR	۷۷
۴-۳-۳- آلیاژ پایه نیکل در محیط PWR	۷۹
۴-۳-۴- فولاد ضد زنگ در محیط PWR	۸۱
۴-۴- اعتبار سنجی مدل	۸۲
۴-۴-۱- پیش بینی تأثیر غلظت اکسیژن محلول	۸۳
۴-۴-۲- پیش بینی تأثیر ضریب شدت تنش	۸۵
۴-۵- بررسی اثرات انتشار به کمک تنش	۸۷
۴-۶- تحلیل مسیر ترک منحنی	۹۰
۴-۷- مدل سازی ترک خوردگی بین دانه ای	۹۸
۴-۸- بحث و تحلیل نتایج	۱۰۵
۴-۸-۱- تعامل حلقه باز خورد شیمیایی-مکانیکی	۱۰۵
۴-۸-۲- تفسیر فیزیکی پارامترهای کالیبره شده	۱۰۶
۴-۸-۳- اهمیت اعتبار سنجی پیش بینی کننده	۱۰۷

فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادات ۱۰۹

۵-۱- مقدمه ۱۰۹

۵-۲- خلاصه و نتیجه‌گیری ۱۰۹

۵-۳- پیشنهادات تحقیقات آتی ۱۱۱

منابع و مراجع ۱۱۴

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱- تصویر نمونه از رآکتور آب جو شان و نواحی ای که در آن ها ترک خوردگی گزارش شده است [۵]. ۴
- شکل ۱-۲- نمونه هایی از IGSCC در فولادهای ضد زنگ: پیچ و مهره های رآکتور آب تحت فشار (راست)، غلاف میله کنترل رآکتور آب جو شان (وسط) و جوش لوله ها در رآکتور آب جو شان (چپ) [۵]. ۵
- شکل ۲-۱- عوامل کلی مؤثر در SCC [۳۴]. ۱۲
- شکل ۲-۲- تصویر برداری SEM-EDX از الایه اکسید دوگانه تشکیل شده در سطح یک فولاد ضد زنگ و نقشه عناصر تشکیل دهنده هر لایه [۹]. ۱۳
- شکل ۲-۳- تصاویر نمونه لایه های اکسید تشکیل شده بر روی آلیاژهای پایه نیکل متفاوت در شرایط محیطی یکسان [۳۶]. ۱۴
- شکل ۲-۴- بازسازی سه بعدی ساختار توپولوژیکی اکسیدهای بین دانه ای دو گانه نانومقیاس، شامل لایه اسپینل داخلی متراکم غنی از کروم و لایه اسپینل خارجی غنی از آهن [۳۸]. ۱۴
- شکل ۲-۵- نمایی از مقطع عرضی خوردگی بین دانه ای و ترک خوردگی آن [۳۷]. ۱۶
- شکل ۲-۶- مدل بازسازی شده سه بعدی یک ترک بین دانه ای میان مقیاس با نوارهای تغییر شکل دوقلوی میان مقیاس با چگالی نابجایی بالاتر و تقاطع آن ها با ناحیه نوک ترک [۳۸]. ۱۷
- شکل ۲-۷- بیان کیفی مکانیزم شروع و انتشار SCC آلیاژهای آستنیت در آب با دمای بالا [۱۳]. ۱۸
- شکل ۲-۸- روند تکامل لایه اکسید سطحی در مرزدانه ای که انتقال لغزش نابجایی را مسدود می کند (بالا) و مرزدانه ای که لغزش نابجایی را منتقل می کند (پایین) [۷۲]. ۲۰
- شکل ۲-۹- بیان کلی مکانیسم پارگی فیلم برای SCC [۷۹]. ۲۲

- شکل ۲- ۱۰- همبستگی محیط‌های داخلی و خارجی ترک، آند موضعی در داخل ترک وجود دارد، در حالی که کاتد موضعی روی سطح در معرض آن قرار دارد [۸۷]. ۲۳
- شکل ۲- ۱۱- شرح مکانیسم ترک خوردگی ناشی از تحرک سطحی [۹۰]. ۲۴
- شکل ۲- ۱۲- بیان عمومی قوانین مختلف ناحیه چسبنده برای بارگذاری سطح مشترک [۱۰۸]. ۲۸
- شکل ۲- ۱۳- مدل ژو-نیدلمن برای حالات خالص عمودی (بالا) و مماسی (پایین) [۱۱۴]. ۳۱
- شکل ۲- ۱۴- نمایش اثر تنش‌های همگن (کششی/فشاری) بر فواصل جهش و انرژی‌های پتانسیل [۱۱۸]. ۳۳
- شکل ۳- ۱- بیان کلی مسئله مکانیکی شیمیایی و دامنه‌های مورد صدق. ۳۸
- شکل ۳- ۲- حالت‌های تغییر شکل نیافته و تغییر شکل یافته ناحیه چسبنده. ۴۲
- شکل ۳- ۳- نمودارهای TSL مدل CZM ژو-نیدلمن. ۴۲
- شکل ۳- ۴- اثر افزایش c بر نمودارهای TSL در حالت‌های خالص عمودی و مماسی. ۴۳
- شکل ۳- ۵- (الف) حالت‌های تغییر شکل نیافته و تغییر شکل یافته محیط پیوسته دارای سطح مشترک چسبنده، (ب) المان چسبنده در هنگام جداسازی و (پ) تبدیل محورها. ۴۸
- شکل ۳- ۶- تصویر المان‌ها در مختصات طبیعی. ۵۶
- شکل ۳- ۷- الگوریتم حل غیرخطی میدان جابجایی در هر تکرار حل میدان غلظت. ۶۴
- شکل ۳- ۸- فلوچارت الگوریتم حل غیرخطی گام زمانی برای میدان غلظت. ۶۵
- شکل ۴- ۱- منحنی‌های نیرو-جابجایی بدست آمده آزمایشگاهی و محاسباتی آزمایش DCB. ۶۹

شکل ۴-۲- مقایسه نتایج محاسبات با راه حل تحلیلی برای یک دامنه محدود یک بعدی با مقادیر مرزی مشخص در زمان‌های مختلف. ۷۰

شکل ۴-۳- نمای کلی نمونه فشرده کششی و شرایط مرزی غلظت قرار داده شده. ۷۲

شکل ۴-۴- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۷۵

شکل ۴-۵- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۷۵

شکل ۴-۶- کانتورهای تنش راستای عمودی در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول. ۷۶

شکل ۴-۷- حالت تغییر شکل یافته نمونه بعد از پیش‌روی ترک به اندازه ۳,۳۹ mm برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول. ۷۶

شکل ۴-۸- مقدار رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۷۷

شکل ۴-۹- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۷۸

شکل ۴-۱۰- کانتور تنش راستای عمودی برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه ۲,۸۵ mm. ۷۸

شکل ۴-۱۱- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۷۹

شکل ۴-۱۲- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۸۰

شکل ۴-۱۳- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه ۳,۱ mm ۸۰

شکل ۴-۱۴- مقدار رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۸۱

شکل ۴-۱۵- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۸۲

شکل ۴-۱۶- کانتورهای تنش راستای عمودی در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول. ۸۲

شکل ۴-۱۷- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۸۴

شکل ۴-۱۸- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۸۴

شکل ۴-۱۹- مقادیر رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضرایب شدت تنش متفاوت. ۸۶

شکل ۴-۲۰- مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی برای اثرات ضریب شدت تنش. ۸۷

شکل ۴-۲۱- مقدار رشد ترک در طول زمان بدون در نظرگیری عبارت انتشار به کمک تنش برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ۸۸

شکل ۴-۲۲- مقایسه پیش‌روی ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ در محیط BWR با ۲۰۰۰ اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در هنگام فعال بودن و غیرفعال بودن عبارت انتشار به کمک تنش. خط نقطه‌چین نشان دهنده مدل همبسته کامل (فعال بودن انتشار به کمک تنش) و خط ممتد نشان دهنده مدل همبسته جزئی (غیرفعال بودن انتشار به کمک تنش) است. ۸۹

شکل ۴-۲۳- تصویر عرضی رشد ترک در یکی از نمونه‌های آزمایشگاهی بررسی شده فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR [۱۲۸]. ۹۰

شکل ۴-۲۴- المان بندی نمونه و مسیر پیش‌روی ترک مورد بررسی با: الف) انحراف کم ب) انحراف متوسط و پ) انحراف زیاد نسبت به مسیر مستقیم. خط‌چین سیاه بیان‌گر ترک از پیش موجود و خط سبز بیان‌گر مسیر در نظر گرفته شده برای پیش‌روی ترک می‌باشد و فلش‌های سیاه نشان دهنده محل و جهت بار اعمال شده می‌باشند. ۹۱

شکل ۴-۲۵- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم. ۹۲

شکل ۴-۲۶- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۹۳

شکل ۴-۲۷- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه 2.6 mm در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم. ۹۳

شکل ۴-۲۸- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف متوسط از مسیر مستقیم. ۹۴

شکل ۴-۲۹- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف متوسط از مسیر مستقیم. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۹۵

شکل ۴-۳۰- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه 3 mm در مقدار انحراف متوسط از مسیر مستقیم. ۹۵

شکل ۴-۳۱- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم. ۹۶

شکل ۴-۳۲- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۹۷

شکل ۴-۳۳- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه 2.6 mm در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم. ۹۷

شکل ۴-۳۴- مسئله مورد بررسی در پژوهش آوٹ و همکاران برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای [۱۲۶]. ۹۹

شکل ۴-۳۵- نمای کلی و المان بندی مسئله مورد بررسی برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای. ۹۹

شکل ۴-۳۶- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان. ۱۰۰

شکل ۴-۳۷- مقادیر غلظت در راستای مرز بین دانه‌ای برای رشد ترک‌ها متفاوت. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد. ۱۰۱

شکل ۴-۳۸- نمای تغییر شکل یافته در هنگام پیش‌روی ترک بین دانه‌ای. ۱۰۲

شکل ۴-۳۹- کشش عمودی المان‌های چسبنده در راستای مرز بین دانه‌ای در طول ترک‌های متفاوت. ۱۰۳

شکل ۴-۴۰- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان با یک و نیم برابر کردن انرژی شکست بین دانه‌ای. ۱۰۴

شکل ۴-۴۱- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان با دو برابر کردن انرژی شکست بین دانه‌ای. ۱۰۴

فهرست جداول

جدول ۴-۱- پارامترهای مکانیکی در نظر گرفته شده برای مواد مورد بررسی. ۷۳

جدول ۴-۲- پارامترهای کالیبره شده مدل برای ترکیب‌های ماده-محیط استفاده شده در صنعت.. ۷۴

جدول ۴-۳- نتایج نرخ رشد ترک برای ضرایب شدت تنش متفاوت. ۸۵

فصل ۱: مقدمه

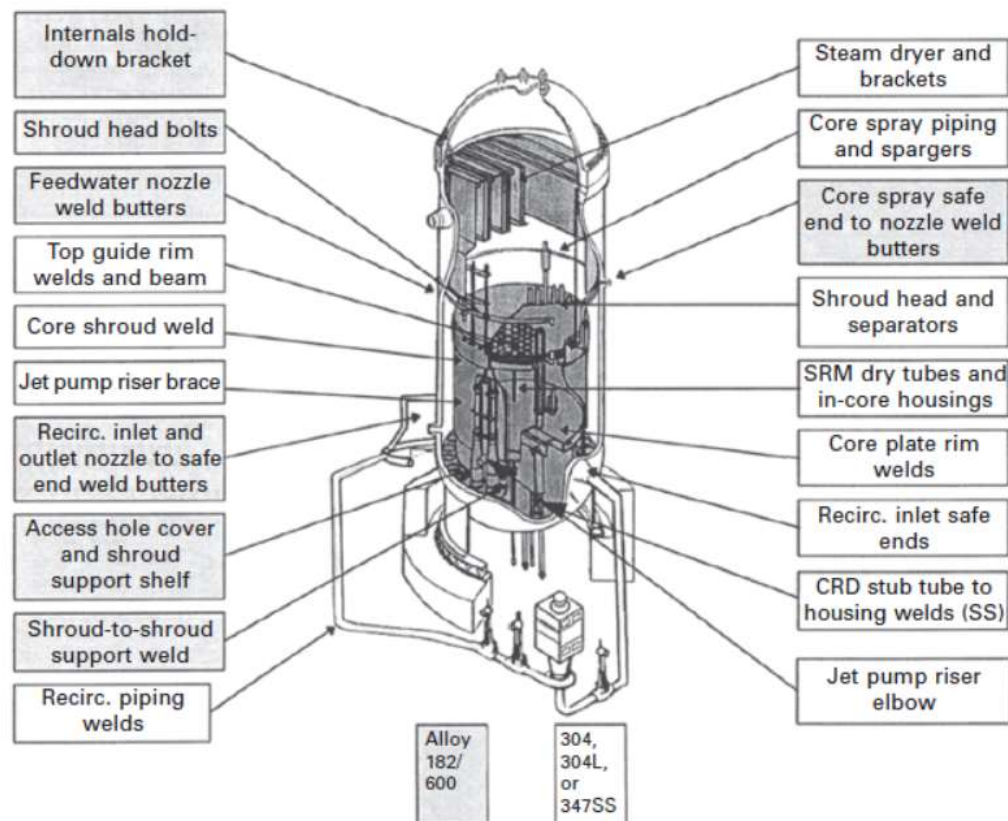
۱-۱- بیان مسئله

شکست زودرس و اغلب فاجعه‌بار اجزای مهندسی حیاتی، از مخازن راکتور هسته‌ای گرفته تا سازه‌های هوافضا، اغلب به پدیده مخرب ترک‌خوردگی تنش-خوردگی^۱ (SCC) نسبت داده می‌شود [۱] (شکل ۱-۱). این فرآیند تخریب^۲ مواد با اثر هم‌افزایی تنش کششی پایدار و یک محیط خورنده^۳ خاص تعریف می‌شود که در کنار هم می‌توانند باعث شروع و انتشار ترک در یک ماده مستعد این گونه ترک‌خوردگی شوند و اغلب منجر به شکست ناگهانی بدون تغییر شکل پلاستیک قابل توجه قبلی می‌شوند [۲، ۳]. خطر SCC در توانایی آن در ایجاد شکست در سطوح تنش بسیار پایین‌تر از استحکام تسلیم اسمی ماده نهفته است، که آن را به یک نگرانی مهم در طراحی و نگهداری سازه‌های با طول عمر بالا تبدیل می‌کند [۴].

1 Stress Corrosion Caracking (SCC)

2 Degradation

3 Corrosive



شکل ۱-۱- تصویر نمونه از رآکتور آب جوشان و نواحی‌ای که در آن‌ها ترک خوردگی گزارش شده است [۵].

یک شکل به ویژه مخرب این پدیده، ترک خوردگی تنشی-خوردگی بین دانه‌ای (IGSCC) است که در آن مسیر ترک ترجیحاً از مرزهای دانه‌ها در یک ماده پلی کریستالی پیروی می‌کند (شکل ۱-۲). این حالت شکست در موادی که برای کاربردهای با کارایی بالا حیاتی هستند، مانند فولادهای ضد زنگ آستنیتی^۳ و آلیاژهای پایه نیکل^۴ که در محیط‌های آبی اولیه راکتورهای هسته‌ای استفاده می‌شوند، شایع است [۶، ۷]. حساسیت این مواد به شدت با ریزساختار آنها مرتبط است. به عنوان مثال، عملیات حرارتی^۵ یا تابش پرتو^۶ می‌تواند منجر به رسوب کاربیدهای کروم^۷ در مرزهای دانه شود و مناطق مجاور

1 InterGranular Stress Corrosion Cracking (IGSCC)

2 Polycrystalline

3 Austenitic stainless steel

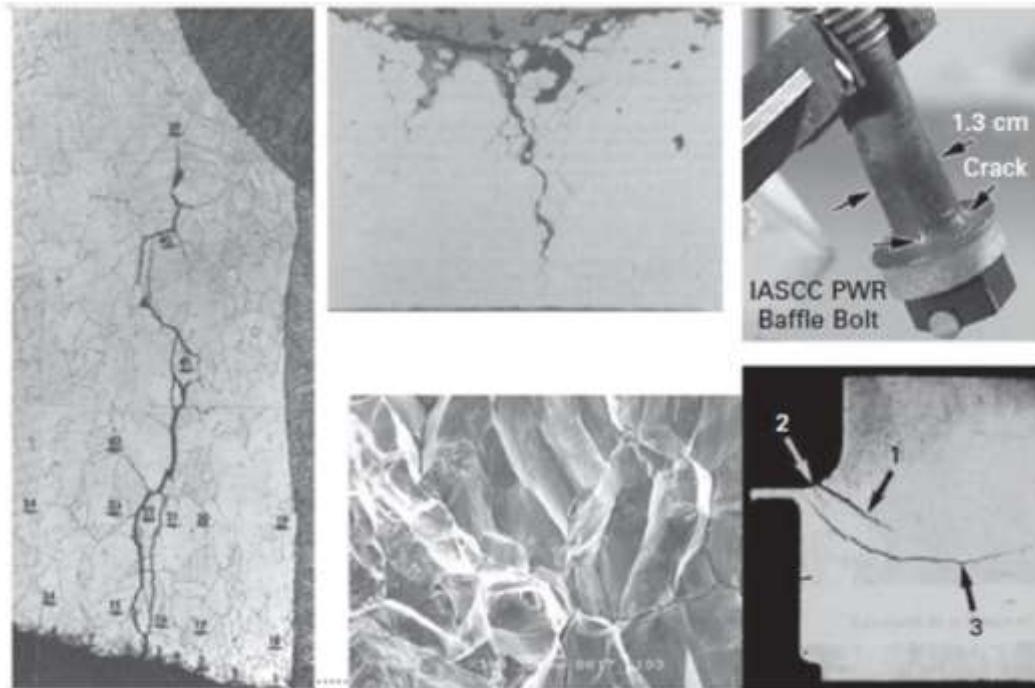
4 Nickel-based

5 Thermal treatment

6 Irradiation

7 Chromium carbides

تهی شده از کروم را ایجاد کند که در برابر خوردگی موضعی و ترک خوردگی متعاقب بسیار آسیب‌پذیر هستند [۸, ۹].



شکل ۱-۲- نمونه‌هایی از IGSCC در فولادهای ضد زنگ: پیچ و مهره‌های رآکتور آب تحت فشار (راست)، غلاف میله کنترل رآکتور آب جوشان (وسط) و جوش لوله‌ها در رآکتور آب جوشان (چپ) [۵].

مکانیسم‌های بنیادی IGSCC پیچیده هستند و شامل تعامل پویای فرآیندهای مکانیکی و شیمیایی در نوک ترک می‌باشند. مکانیسم‌های کلیدی پیشنهادی شامل پارگی لایه نازک/انحلال-لغزش [۱۰, ۱۱] و تردی هیدروژنی [۱۲] هستند که مکانیسم غالب به سیستم خاص ماده-محیط بستگی دارد [۲, ۱۳]. در حالی که این مکانیسم‌ها از نظر تاریخی به صورت جداگانه مورد مطالعه قرار می‌گرفتند، هم‌اکنون وابستگی متقابل آن‌ها در یک حلقه بازخورد شیمیایی-مکانیکی کاملاً هم‌بسته مورد توجه قرار می‌گیرد. تمرکز تنش بالا در نوک ترک، یک نیروی محرکه مکانیکی ایجاد می‌کند که می‌تواند انتشار گونه‌های خورنده، مانند اکسیژن یا هیدروژن، را در امتداد مرز دانه^۵ به طور قابل توجهی تسریع کند

-
- 1 Film rupture
 - 2 Slip dissolution
 - 3 Hydrogen Embrittlement
 - 4 Fully coupled
 - 5 Grain Boundary

[۱۴]. همزمان، تجمع این گونه‌ها در مرز دانه، استحکام چسبندگی ذاتی و انرژی شکست آن را کاهش می‌دهد، فرآیندی که اغلب به عنوان ترد شدگی شناخته می‌شود [۱۵، ۶].

این برهمکنش یک چرخه خود-تداوم بخش ایجاد می‌کند: تنش مکانیکی باعث نفوذ مواد شیمیایی می‌شود که به نوبه خود باعث تخریب مواد می‌شود و پیشروی ترک را تحت بار پایدار آسان‌تر می‌کند [۱۴، ۶]. این پیشروی، نوک ترک را تیزتر می‌کند، میدان تنش موضعی را تشدید می‌کند و فرآیند انتشار تسريع می‌کند. با این حال، مدل‌های پیش‌بینی موجود برای SCC، اغلب این پدیده‌ها را به صورت غیرهمبسته یا همبسته یک طرفه در نظر می‌گیرند [۱۶-۲۵]. این ساده‌سازی نمی‌تواند دینامیک بازخورد ضروری حاکم بر افزایش نرخ رشد ترک را در نظر بگیرد که الهام بخش مسئله علمی اصلی مورد بررسی در این پایان‌نامه می‌باشد: نیاز به یک مدل پیش‌بینی که بتواند ماهیت کاملاً همبسته و گذرای برهمکنش‌های شیمیایی-مکانیکی در مرز دانه را به طور دقیق شبیه‌سازی کند. چنین مدلی نه تنها برای درک فیزیک بنیادی IGSCC، بلکه برای پیش‌بینی نرخ رشد ترک^۲ (CGR) وابسته به زمان، یک پارامتر حیاتی برای یکپارچگی ساختاری و ارزیابی طول عمر اجزای مهندسی حیاتی است [۶، ۲۶].

۱-۲- اهمیت تحقیق

پیشرفت در درک و پیش‌بینی ترک خوردگی ناشی از عوامل محیطی از دیدگاه‌های علمی، مهندسی و محاسباتی از اهمیت بالایی برخوردار است. از دیدگاه مهندسی، توانایی پیش‌بینی دقیق شروع و انتشار IGSCC برای تضمین ایمنی و قابلیت اطمینان سازه‌های با اهمیت بالا بسیار مهم است. یک مدل پیش‌بینی قوی و مبتنی بر فیزیک، امکان تغییر از فلسفه‌های طراحی محافظه‌کارانه و تجربی به ارزیابی دقیق‌تر طول عمر و استراتژی‌های نگهداری پیشگیرانه را فراهم می‌کند و در نتیجه ایمنی را افزایش داده و هزینه‌های عملیاتی را در بخش‌هایی مانند انرژی هسته‌ای و هوافضا کاهش می‌دهد.

از دیدگاه علمی، مطالعه IGSCC دریچه‌ای به فیزیک بنیادی مسائل چند میدانی همبسته فراهم می‌کند. درک چگونگی تعامل میدان‌های تنش مکانیکی و فرآیندهای انتقال شیمیایی در سطح ریزساختار، یک چالش اصلی در علم مواد است. تحقیقات در این زمینه دانش موجود را در مورد تخریب

1 Transient

2 Crack Growth Rate (CGR)

مواد عمیق‌تر می‌کند و بینش‌هایی را ارائه می‌دهد که قابل انتقال به سایر حالت‌های شکست با کمک محیط^۱ هستند.

از نظر محاسباتی، شبیه‌سازی چنین پدیده‌هایی به دلیل همبستگی قوی بین میدان‌های فیزیکی مختلف و غیرخطی بودن ذاتی فرآیند شکست، چالش قابل توجهی را ایجاد می‌کند. توسعه چارچوب‌های عددی پایدار و کارآمد برای حل این سیستم‌های گذرا و همبسته، سهم ارزشمندی در حوزه مکانیک محاسباتی دارد.

این تحقیق از طریق توسعه و پیاده‌سازی یک مدل کاملاً همبسته و گذرا برای IGSCC به این چالش‌های مهم می‌پردازد. نوآوری اصلی این کار، توانایی آن در ثبت حلقه بازخورد پویا و دو طرفه بین تنش مکانیکی و انتشار شیمیایی است، ویژگی‌ای که اغلب در مدل‌های قبلی ساده‌سازی یا نادیده گرفته می‌شد [۲۷، ۲۸]. با حل مسئله در حوزه زمان، این مدل مزیت قابل توجهی نسبت به رویکردهای استاتیکی ارائه می‌دهد و پیش‌بینی مستقیم نرخ رشد ترک را امکان‌پذیر می‌سازد. بنابراین، این پایان‌نامه ابزار فیزیکی واقع‌گرایانه‌تر و از نظر محاسباتی قوی‌تر برای تجزیه و تحلیل IGSCC ارائه می‌دهد و هم علم بنیادی و هم کاربرد مهندسی مکانیک شکست در محیط‌های خورنده را پیش می‌برد.

۳-۱- اهداف تحقیق

هدف اصلی این پایان‌نامه، توسعه و پیاده‌سازی یک مدل المان محدود شیمیایی-مکانیکی گذرا و کاملاً همبسته برای شبیه‌سازی ترک‌خوردگی تنشی-خوردگی بین دانه‌ای است.

برای دستیابی به این منظور، اهداف مشخص زیر تعریف شده‌اند:

- **فرموله کردن یک مدل شیمیایی-مکانیکی همبسته برای IGSCC:** این هدف شامل تعریف روابط ریاضی برهمکنش دو طرفه است که در آن نفوذ گونه‌های خورنده، یکپارچگی مکانیکی مرز دانه‌ها را تخریب می‌کند و در عوض، حالت تنش مکانیکی موضعی^۲ فرآیند نفوذ را تسریع می‌کند.

1 Environmentally assisted fracture

2 Local mechanical stress state

- **مدل‌سازی فرآیند شکست مکانیکی در مرز دانه:** این امر با پیاده‌سازی مدل ناحیه چسبنده^۱ (CZM) محقق خواهد شد، که از قانون کشش-جداشدگی^۲ (TSL) برای توصیف جداشدگی تدریجی و شکست فصل مشترک مواد استفاده می‌کند.
- **مدل‌سازی فرآیند انتشار شیمیایی:** انتقال گونه‌های خورنده در امتداد مرز دانه با استفاده از شکل اصلاح‌شده‌ای از قانون فیک^۳ مدل‌سازی خواهد شد که شامل عبارتی برای انتشار به کمک تنش^۴ است و تأثیر گرادیان کشش بر شار جرمی^۵ را در نظر می‌گیرد.
- **پیاده‌سازی مدل در یک کد المان محدود گذرا:** پاسخ دستگاه معادلات کاملاً همبسته با استفاده از یک روش حل گام زمانی (گام عقب‌گرد اویلر) همراه با یک محاسبه گر تکرار نیوتن-رافسون^۶ برای مدیریت غیرخطی بودن ذاتی مسئله محاسبه خواهد شد.
- **شبیه‌سازی و تحلیل نرخ رشد ترک:** مدل اعتبارسنجی شده برای پیش‌بینی نرخ پیش‌روی IGSCC تحت شرایط بارگذاری و محیطی مختلف استفاده خواهد شد و بینش‌هایی در مورد پارامترهای کلیدی کنترل‌کننده شکست ارائه خواهد شد.

۱-۴- ساختار پایان‌نامه

این پایان‌نامه در پنج فصل سازماندهی شده است. فصل ۱ به معرفی مسئله IGSCC پرداخته و اهداف و دستاوردهای تحقیق را تشریح کرده است. فصل ۲ مروری جامع بر پیشینه نظری و ادبیات مرتبط با ماهیت چندفیزیکی^۸ قضیه، مکانیک شکست، مدل‌سازی ناحیه چسبنده و مدل‌های شیمیایی-مکانیکی همبسته برای SCC ارائه می‌دهد. فصل ۳ به تفصیل فرمول‌بندی کامل ریاضی و عددی مدل پیشنهادی، شامل معادلات حاکم، روابط ساختاری و پیاده‌سازی المان محدود را شرح می‌دهد. فصل ۴ نتایج شبیه‌سازی‌های عددی، شامل اعتبارسنجی مدل و مطالعات پارامتری را ارائه می‌دهد و پس از آن بحث مفصلی در مورد یافته‌ها ارائه می‌شود. در نهایت، فصل ۵ نتیجه‌گیری‌های کلیدی این کار را خلاصه کرده و پیشنهاداتی برای تحقیقات آینده ارائه می‌دهد.

1 Cohesive Zone Model (CZM)
 2 Traction Separation Law (TSL)
 3 Fick's law
 4 Stress asisted diffusion
 5 Mass flux
 6 Backward Euler
 7 Newton-Raphson iteration
 8 Multiscale

فصل ۲: پیشینه و مرور ادبیات فنی

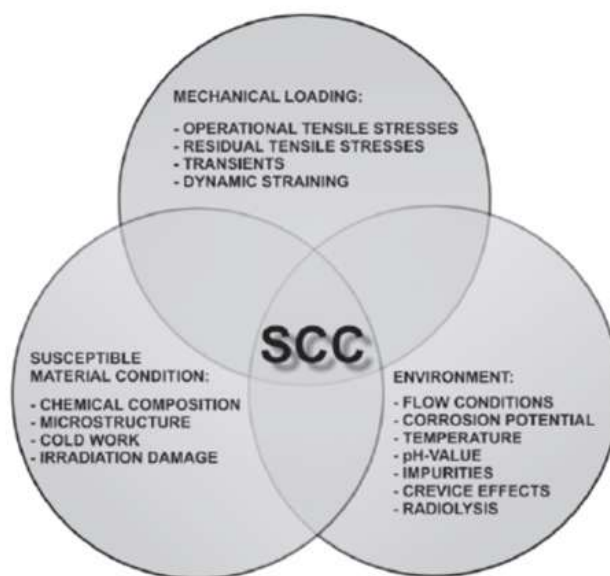
۲-۱- مقدمه

این فصل، مبانی نظری را پایه‌ریزی کرده و پژوهش حاضر را در چارچوب متون علمی موجود، زمینه‌سازی می‌کند. درک کامل ترک‌خوردگی تنشی بین‌دانه‌ای (IGSCC) نیازمند رویکردی چندرشته‌ای است که از مکانیک شکست، علم مواد و پدیده‌های انتقال بهره می‌برد. هدف اصلی این بازنگری، ترکیب دانش پیشرفته فعلی در این حوزه‌های کلیدی برای ایجاد استدلالی منسجم برای ضرورت و نوآوری مدل گذرای کاملاً همبسته توسعه‌یافته در این پایان‌نامه است.

برای دستیابی به این هدف، این فصل به گونه‌ای ساختار یافته است که خواننده را از فیزیک بنیادی مسئله به ابزارهای عددی خاص مورد استفاده در شبیه‌سازی آن هدایت کند. این مهم با بررسی ماهیت پیچیده و چندمقیاسی IGSCC آغاز می‌شود و مکانیسم‌های اولیه حاکم بر شروع و پیشروی آن را شرح می‌دهد. در ادامه، مبانی نظری دو مؤلفه اصلی مدل عددی بررسی می‌شود: مدل‌سازی ناحیه چسبنده (CZM) برای فرآیند شکست مکانیکی و قوانین فیک برای فرآیند انتشار شیمیایی، با تمرکز ویژه بر مفهوم مهم انتشار به کمک تنش. در نهایت، مدل‌های عددی موجود برای IGSCC به طور انتقادی تجزیه و تحلیل می‌شوند و بر اساس سطح همبسته سازی شیمیایی-مکانیکی آنها طبقه‌بندی می‌شوند تا شکاف تحقیقاتی که این کار قصد پر کردن آن را دارد، به وضوح مشخص شود.

۲-۲- مکانیک ترک خوردگی تنشی-خوردگی بین دانه‌ای

IGSCC توسط یک مکانیسم واحد و کلی کنترل نمی‌شود، بلکه پدیده‌ای پیچیده است که ناشی از تعامل چندین فرآیند متفاوت و اغلب با هم‌افزایی آن‌ها است که در مرز دانه‌های یک ماده مستعد، یا نزدیکی آن رخ می‌دهند. مکانیسم غالب به شدت به سیستم خاص ماده-محیط، از جمله ریزساختار آلیاژ، شیمی محیط خورنده و ماهیت تنش اعمال شده وابسته است [۲۹، ۳۰] (شکل ۲-۱). دهه‌ها تحقیق منجر به توسعه چندین نظریه کلیدی مکانیکی شده است [۳۱-۳۳]. با این حال، قبل از بررسی دقیق این مدل‌های خاص، درک زمینه فیزیکی فراگیری که تحت آن عمل می‌کنند، بسیار مهم است. تکنیک‌های توصیفی تصویربرداری با وضوح بالا نشان داده‌اند که IGSCC اساساً یک فرآیند چندمقیاسی است که شامل محدوده‌ای از پدیده‌های تخریب است که از مقیاس نانو تا مقیاس میکرو را در بر می‌گیرد [۱۳].



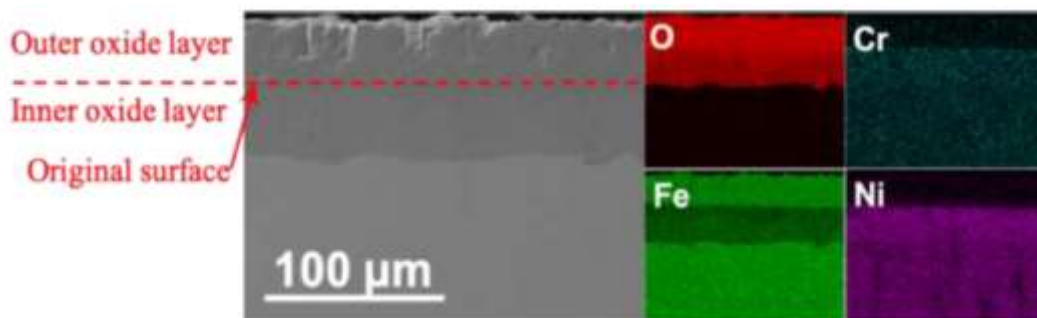
شکل ۲-۱ عوامل کلی مؤثر در SCC [۳۴].

۲-۲-۱- ماهیت چندفیزیکی IGSCC

بررسی‌های توصیفی پیشرفته نشان داده است که IGSCC یک رویداد یکپارچه نیست، بلکه دنباله‌ای از فرآیندهای به هم پیوسته است که در مقیاس‌های طولی مختلف رخ می‌دهند. فرآیند شکست با برهمکنش‌های سطح اتمی آغاز می‌شود و در انتشار ترک در مقیاس میکرو به اوج خود می‌رسد. درک جامع نیاز به بررسی پدیده‌ها در هر یک از این مقیاس‌ها دارد [۲].

۲-۱-۲-۱- فیزیک مقیاس نانو

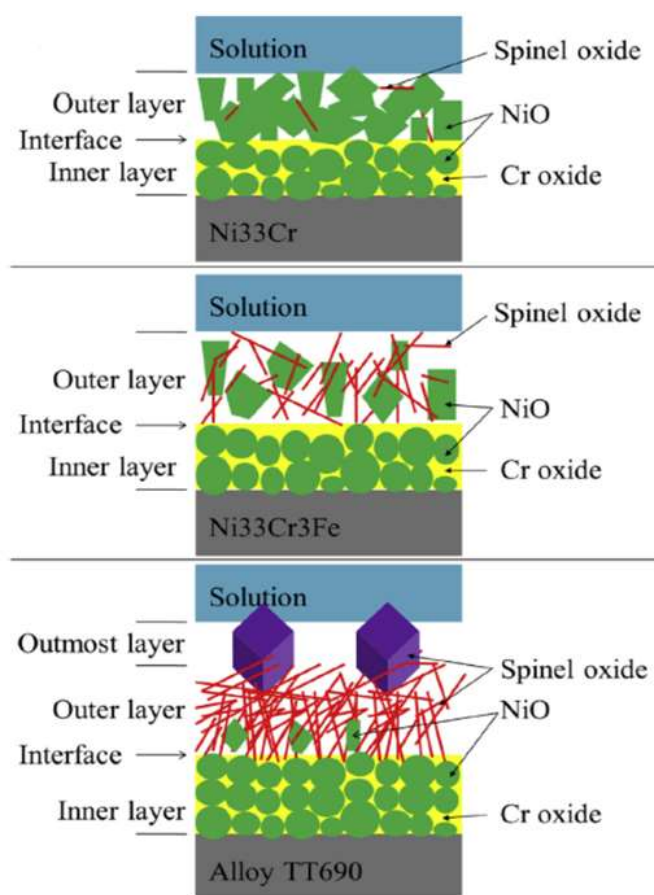
در کوچکترین مقیاس، این فرآیند تحت تأثیر خوردگی سطحی^۱ و بین دانه‌ای^۲ است. در محیط‌های آبی با دمای بالا، معمولاً یک لایه اکسید دوگانه^۳ روی ماده تشکیل می‌شود [۹، ۳۵، ۳۶]. در خوردگی سطحی این لایه شامل یک لایه داخلی پیوسته، متراکم و ترد^۴ غنی از کروم (مثلاً کاربید کرومیوم^۵ Cr_2O_3) یا اسپینل‌های غنی از کروم) و یک لایه بیرونی متخلخل تر و زبرتر متشکل از اسپینل‌های غنی از آهن و نیکل است (شکل ۲-۲).



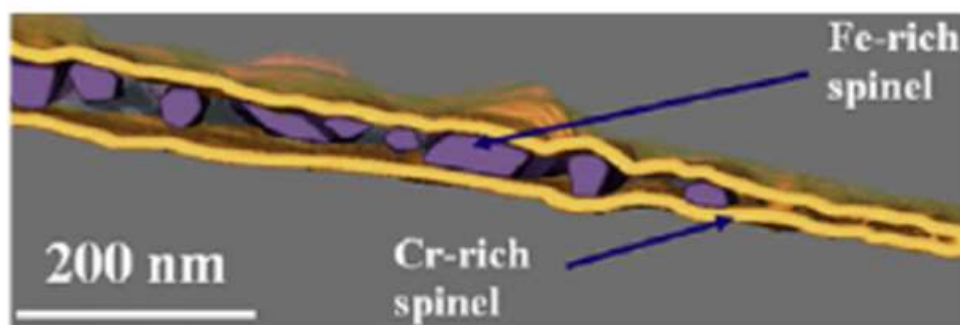
شکل ۲-۲- تصویر برداری SEM-EDX از لایه اکسید دوگانه تشکیل شده در سطح یک فولاد ضد زنگ و نقشه عناصر تشکیل دهنده هر لایه [۹].

ترکیب و ضخامت لایه‌های اکسید دوگانه سطحی تشکیل شده در هر آلیاژ و محیط خوردنده‌ای متفاوت می‌باشد و وابسته به نوع آلیاژ و خواص شیمیایی محیط نتایج متفاوتی حاصل خواهد شد [۱۳، ۳۶] (شکل ۲-۳). در خوردگی بین دانه‌ای نیز تشکیل لایه اکسید دوگانه دیده می‌شود که به صورت تشکیل لایه متخلخل بیرونی و لایه پیوسته درونی غنی از کروم می‌باشد که همراه با نفوذ لایه درونی به داخل مرز بین دانه‌ای است [۳۷] (شکل ۲-۴).

-
- 1 Surface corrosion
 - 2 Intergranular corrosion
 - 3 Duplex layer
 - 4 Brittle
 - 5 Chromium carbide
 - 6 Spinel



شکل ۲-۳- تصاویر نمونه لایه‌های اکسید تشکیل شده بر روی آلیاژهای پایه نیکل متفاوت در شرایط محیطی یکسان [۳۶].



شکل ۲-۴- بازسازی سه‌بعدی ساختار توپولوژیکی اکسیدهای بین دانه‌ای دو گانه نانومقیاس، شامل لایه اسپینل داخلی متراکم غنی از کروم و لایه اسپینل خارجی غنی از آهن [۳۸].

یکپارچگی لایه داخلی غنی از کروم نقش بسیار مهمی را ایفا می‌کند؛ شکست ترد ناشی از کرنش در این لایه اغلب اولین گام در شروع ترک است. همزمان، جداشدگی عناصر^۱ در امتداد مرزهای دانه رخ می‌دهد که ناشی از تخلیه کروم^۲ و غنی شدن نیکل^۳ در نواحی بلافاصله مجاور مرز می‌باشد و یک مسیر موضعی با قابلیت شکست بالا ایجاد می‌کند [۳۹]. به طور معمول، تخلیه کروم به صورت یک‌جانبه (فقط در یک سمت مرز بین دانه‌ای) می‌باشد که منجر به مهاجرت مرز بین دانه‌ای^۴ در هنگام ترک خوردگی می‌شود [۴۰، ۴۱]. همان‌طور که در شکل (۲-۵) نشان داده شده است، لایه‌های اکسید دوگانه در روی سطح و در دیواره‌های ترک دیده می‌شود و همچنین نفوذ لایه اکسید داخلی به درون مرز بین دانه‌ای، مهاجرت مرز بین دانه‌ای و تشکیل کاربیدهای کروم به همراه تخلیه کروم در نواحی جلوتر از نوک ترک مشهود است [۴۲]. تشکیل لایه‌های اکسید دوگانه توسط دو مکانیسم اصلی توصیف می‌شود که در شرایط راکتور آب جوش^۵ (BWR)، تحت فشار^۶ (PWR) و فوق بحرانی^۷ (SCWR) صدق می‌کنند: [۴۳]، انحلال-رسوب^۸ و انتشار-اکسیداسیون^۹. مکانیسم انحلال-رسوب عامل تشکیل لایه اکسید بیرونی غنی از آهن یا نیکل است، این مکانیسم شامل انحلال الکتروشیمیایی اتم‌های فلز در آب و به دنبال آن رسوب هیدروکسیدهای فلزی است که سپس اکسیدهای اسپینل را تشکیل می‌دهند [۴۳-۴۹]. مکانیسم انتشار-اکسیداسیون لایه محافظ غنی از کروم داخلی را تشکیل می‌دهد، این مکانیسم شامل انتشار رو به داخل عوامل اکسیداسیون (مانند O^{2-}) و انتشار رو به بیرون اتم‌های فلز از طریق مسیرهای اتصال کوتاه مانند مرز دانه‌ها و نواحی متمرکز نابجایی می‌باشد. حساسیت بالاتر کروم به اکسیداسیون و انرژی فعال‌سازی پایین‌تر آن برای انتشار، به تخلیه کروم خاص مشاهده شده در نزدیکی این مناطق اکسید شده کمک می‌کند [۵۰-۵۵].

1 Elemental segregation

2 Chromium depletion

3 Nickel enrichment

4 Grain boundary migration

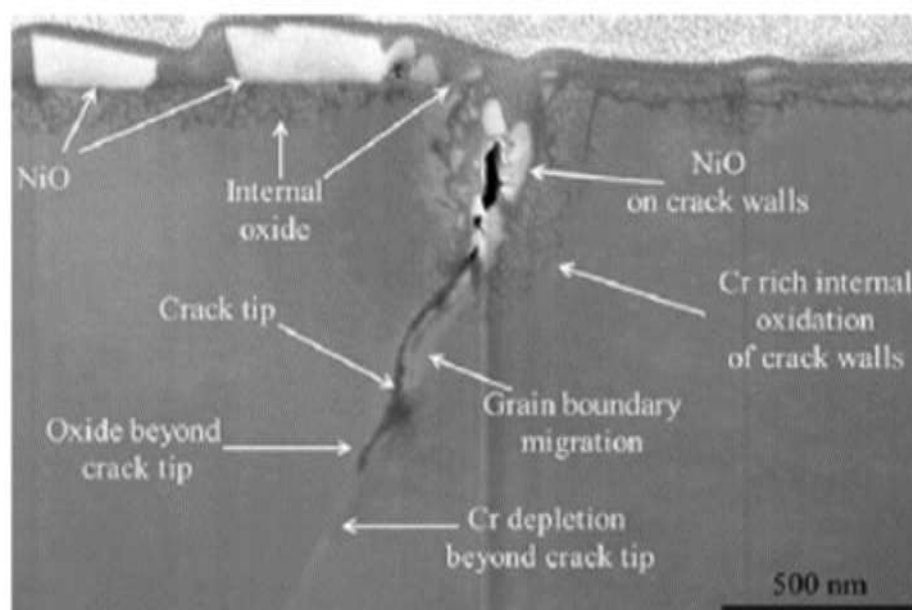
5 Boiling Water Reactor (BWR)

6 Pressurized Water Reactor (PWR)

7 Supercritical Water Reactors (SCWR)

8 Dissolution-Precipitation

9 Diffusion-Oxidation



شکل ۲-۵- نمایی از مقطع عرضی خوردگی بین دانه‌ای و ترک خوردگی آن [۳۷].

۲-۱-۲-۲- فیزیک مقیاس میانی^۱

بین مقیاس‌های نانو و میکرو، برهمکنش بین ریزساختار ماده و میدان تنش موضعی برجسته می‌شود [۵۶]. تغییر شکل پلاستیک، به ویژه در مواد نورد سرد شده، که به صورت نوارهای تغییر شکل^۳ (مثلاً نوارهای دوقلو)^۴ آشکار می‌شوند، و با چگالی بالای نابجایی مشخص می‌شوند، به عنوان مسیرهای ترجیحی برای اکسیداسیون عمل می‌کنند و با تقاطعشان با دیواره‌های ترک و یا ناحیه نوک ترک به طور مؤثر حمله خورنده را به داخل ماده هدایت می‌کنند [۵۷-۶۰] (شکل ۲-۶). این مسیرهای اکسیداسیون ترجیحی را به عنوان نتیجه‌ای از افزایش واکنش‌پذیری توده آلیاژ^۵ که ناشی از افزایش انرژی کرنشی است، در نظر می‌گیرند [۶۱]. همان‌طور که در مقیاس پایین‌تر نیز مشاهده می‌شد، جداشدگی عناصر (تخلیه کروم) و اکسیداسیون ترجیحی توسط نفوذ اتصال کوتاه هدایت می‌شوند، که در آن اتم‌های کروم و اکسیژن به سرعت در امتداد مسیرهای با انتشارپذیری بالا مانند مرز دانه‌ها و نواحی متمرکز نابجایی حرکت می‌کنند. انتشارپذیری در این مسیرها در مقایسه با توده حجمی به طور

1 Meso scale

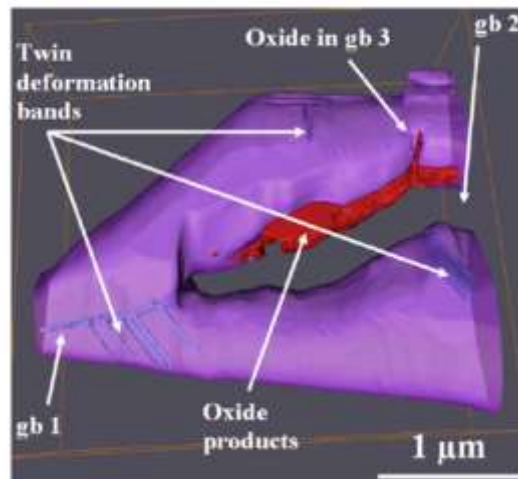
2 Cold work

3 Deformation band

4 Twin band

5 Alloy bulk

قابل توجهی بالاتر است، زیرا این نقص‌های ساختاری فضای آزاد بیشتری ایجاد می‌کنند و برای حرکت اتمی به انرژی فعال‌سازی کمتری نیاز دارند [۶۲].



شکل ۲-۶- مدل بازسازی شده سه‌بعدی یک ترک بین دانه‌ای میان‌مقیاس با نوارهای تغییر شکل دوقلوی میان‌مقیاس با چگالی نابجایی بالاتر و تقاطع آن‌ها با ناحیه نوک ترک [۳۸].

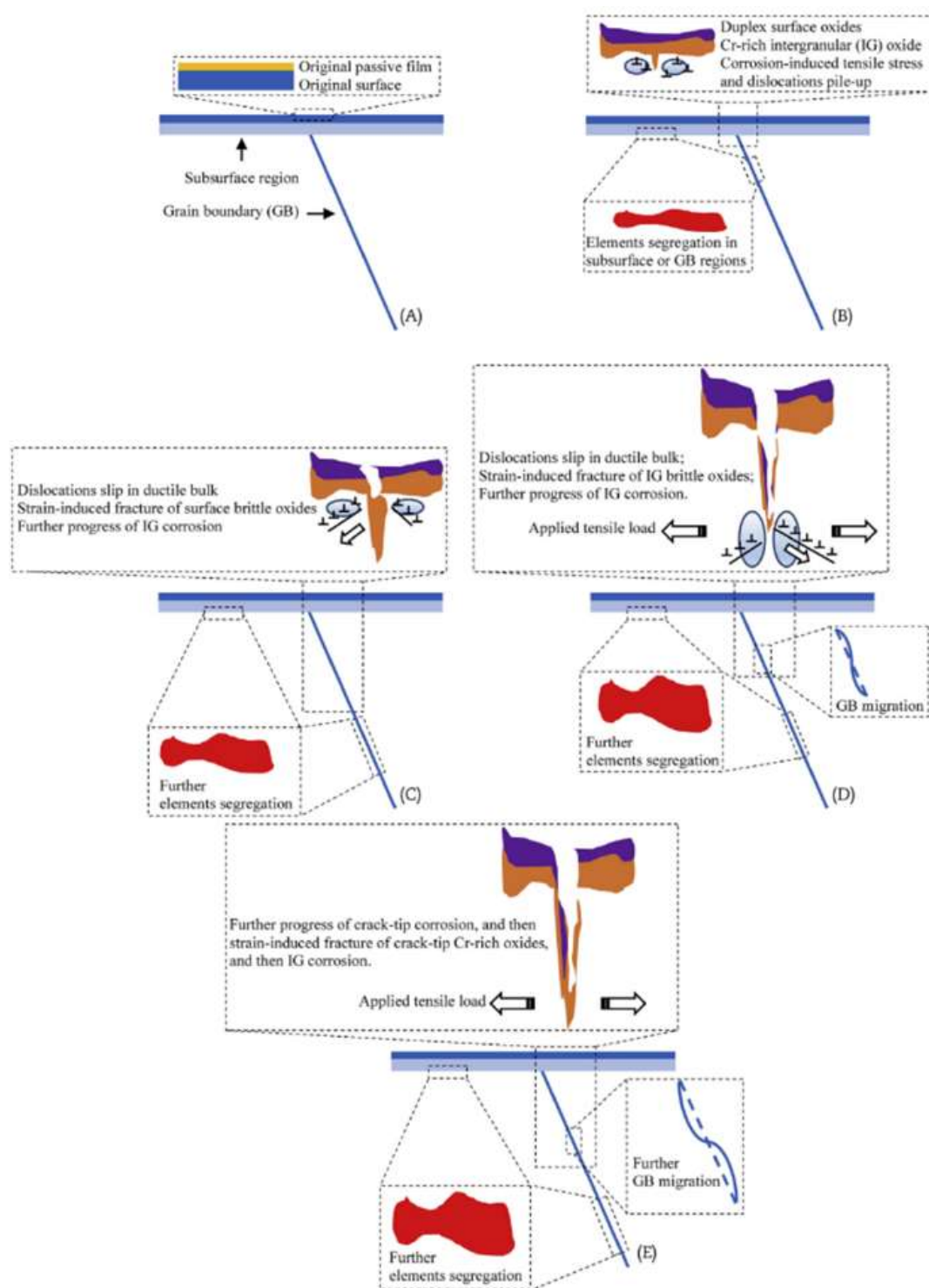
یک پدیده کلیدی در مقیاس مزو، مهاجرت مرز دانه ناشی از انتشار^۱ (DIGM) است. انتشار اتصال کوتاه اتم‌های کروم از مرز دانه برای تغذیه اکسید در حال رشد در نوک ترک، یک گرادیان پتانسیل شیمیایی ایجاد می‌کند که مهاجرت فیزیکی مرز دانه را هدایت می‌کند و ردی از ماده غنی از کروم و غنی از نیکل را به جا می‌گذارد که در برابر حمله بیشتر بسیار آسیب‌پذیر است. با انتشار نابرابر اتم‌ها در دو طرف امتداد مرز بین دانه‌ای، فضای خالی^۲ ایجاد می‌شود. جذب این فضاهای خالی توسط نابجایی‌ها در محدوده مرز بین دانه‌ای باعث لغزش آن‌ها می‌شود و در نتیجه مرز بین دانه‌ای نیز حرکت می‌کند [۶۳، ۶۴].

۲-۲-۱-۳- فیزیک مقیاس میکرو

در مقیاس ساختار دانه، اثر تجمعی این فرآیندهای ریزتر منجر به تشکیل و انتشار یک ترک ماکروسکوپی می‌شود. این فرآیند را می‌توان به صورت یک توالی چهار مرحله‌ای در نظر گرفت [۱۳]. در شکل ۲-۷ شرح کیفی بسط داده شده این مراحل دیده می‌شود.

1 Diffusion-Induced Grain boundary Migration (DIGM)

2 Vacancy



شکل ۲-۷- بیان کیفی مکانیزم شروع و انتشار SCC آلیاژهای آستنیت در آب با دمای بالا [۱۳].

خوردگی اولیه: خوردگی سطحی و بین دانه‌ای آغاز می‌شود و لایه‌های اکسیدی تشکیل شده و باعث جداشدگی عناصر می‌شود که مقاومت موضعی مرز دانه را کاهش می‌دهد.

شکست اکسید سطحی: تمرکز تنش و لغزش^۱ نابجایی‌ها در توده ماده انعطاف‌پذیر^۲ کرنشی ایجاد می‌کند که اکسیدهای سطحی ترد را می‌شکند و به محیط خورنده اجازه می‌دهد تا به عمق بیشتری دسترسی پیدا کند.

شکست اکسید بین دانه‌ای: خوردگی در امتداد مرز دانه‌ها پیشرفت می‌کند و یک لایه اکسید غنی از کروم و شکننده تشکیل می‌دهد. لغزش مداوم نابجایی‌ها باعث شکستگی این اکسید بین دانه‌ای و پیشرفت ترک می‌شود. این مرحله اغلب با DIGM همراه است.

پیشروی نوک ترک: این فرآیند در نوک ترک متمرکز می‌شود، جایی که چرخه‌ای از اکسیداسیون ترجیحی ماده‌ی تحت تنش بالا، و به دنبال آن شکستگی ناشی از کرنش اکسید ترد تازه تشکیل شده، ترک را به جلو می‌راند [۶۵-۶۸].

۲-۲-۲- نقش ویژگی‌های مرزدانه

مستعد بودن یک ماده پلی کریستالی به IGSCC در تمام مرزدانه‌ها یکسان نیست. ویژگی خاص مرزدانه شامل ناهم‌سویی کریستالوگرافی^۳، پتانسیل شیمیایی و شیمی موضعی آن، نقش تعیین‌کننده‌ای در تعیین آسیب‌پذیری آن در برابر ترک‌خوردگی دارد. تحقیقات نشان داده است که همه مرزدانه‌ها ویژگی‌های یکسانی ندارند؛ برخی در برابر ترک‌خوردگی بسیار مقاوم هستند در حالی که برخی دیگر مسیرهای آسانی برای انتشار فراهم می‌کنند [۶۹].

جهت‌گیری ناهم‌سو مرز دانه‌ها: زاویه و محور جهت‌گیری ناهم‌سو بین دانه‌های مجاور یک عامل کلیدی است. مرزهای دانه‌ای با زاویه زیاد^۴ که ساختار اتمی نامنظم‌تری دارند، عموماً پتانسیل شیمیایی بالاتر و سرعت انتشار سریع‌تری را نشان می‌دهند و این امر آنها را مستعد انحلال و شکنندگی می‌کند. در مقابل، مرزهای دانه‌ای با زاویه کم^۵ و مرزهای خاص محل انطباق شبکه‌ای^۶ (CSL) (مرزهای ویژه با درجه بالایی از تطابق اتمی) اغلب مقاومت قابل توجه بالاتری در برابر IGSCC نشان می‌دهند [۷۰].

1 Slip

2 Ductile bulk material

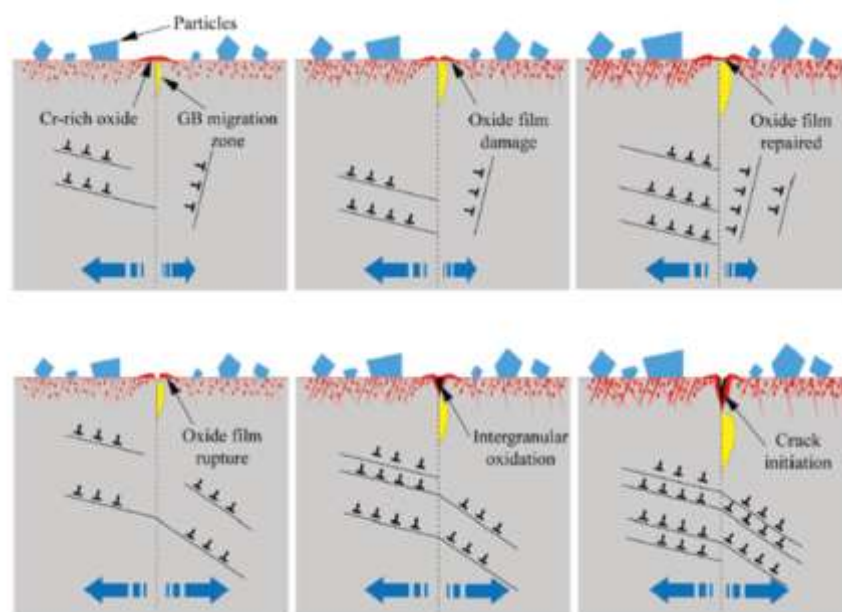
3 Crystallographic misorientation

4 High-angle grain boundaries

5 Low-angle grain boundaries

6 Coincidence Site Lattice

برهمکنش با نابجایی‌ها: نحوه‌ی برهمکنش مرزهای دانه با نابجایی‌های کریستالی نیز بسیار مهم است. مرزهای دانه می‌توانند به عنوان موانعی در برابر حرکت نابجایی‌ها عمل کنند و منجر به انباشتگی تنش شوند که می‌تواند به صورت موضعی نیروی محرکه‌ی شکست را تشدید کند. از طرف دیگر، آن‌ها می‌توانند انتقال لغزش از یک دانه به دانه‌ی بعدی را ممکن سازند [۷۱]. مطالعات اخیر، همبستگی مستقیمی بین حالت برهمکنش لغزش/مرز دانه و شروع SCC نشان داده‌اند. به عنوان مثال، در آلیاژ پایه نیکل ۶۹۰، مرزهای دانه‌ای که به طور مؤثر لغزش نابجایی‌ها را مسدود می‌کنند، مقاومت بیشتری در برابر ترک‌خوردگی نسبت به مرزهایی که به راحتی لغزش را منتقل می‌کنند، که نشان می‌دهد حالت کرنش موضعی در مرز، یکی از عوامل اصلی در شروع شکست است [۷۲، ۱۳] (شکل ۲-۸).



شکل ۲-۸ - روند تکامل لایه اکسید سطحی در مرزدانه‌ای که انتقال لغزش نابجایی را مسدود می‌کند (بالا) و مرزدانه‌ای که لغزش نابجایی را منتقل می‌کند (پایین) [۷۲].

همانطور که دیده شد، عوامل مؤثر زیادی در مقیاس‌های مختلف بر IGSCC تأثیر می‌گذارند و بسته به شرایط متفاوت تأثیر آن‌ها نیز می‌تواند متفاوت باشد. این دیدگاه چندمقیاسی روشن می‌کند که مکانیسم‌های کلاسیک IGSCC مستقل نیستند، بلکه جنبه‌های نسبتاً متفاوتی از یک فرآیند واحد و پیچیده هستند. بخش‌های بعدی این مکانیسم‌های کلاسیک را در این زمینه به تفصیل شرح می‌دهند.

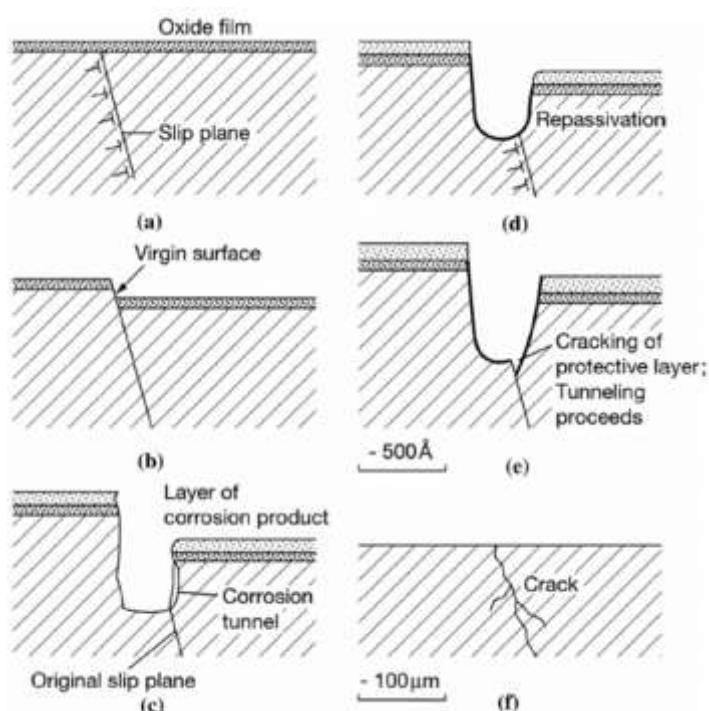
۲-۲-۳- مدل اکسیداسیون لغزش^۱

این مدل که با نام‌های مدل انحلال لغزش^۲ یا پارگی فیلم^۳ یا مدل فورد-آندرسن^۴ نیز شناخته می‌شود، یک چارچوب به طور گسترده پذیرفته شده است [۷۳، ۷۴]. این فرضیه بیان می‌کند که SCC از طریق یک فرآیند چرخه‌ای پیش می‌رود. یک لایه اکسید محافظ در نوک ترک به دلیل کرنش پاره می‌شود و فلز دست‌نخورده زیر آن را نمایان می‌کند. این فلز نمایان به سرعت اکسید می‌شود (انحلال پیدا می‌کند)، که باعث پیشرفت ترک تا زمانی که لایه منفعل^۵ دوباره تشکیل شود، می‌شود و رشد را به طور موقت متوقف می‌کند. این فرآیند با ادامه کرنش برای پاره کردن لایه تازه تشکیل شده تکرار می‌شود. بنابراین، CGR توسط رقابت بین نرخ پارگی لایه منفعل و نرخ تشکیل لایه منفعل مجدد کنترل می‌شود (شکل ۲-۹). این مدل از قانون فارادی^۶ برای پیش‌بینی کمی CGR استفاده می‌کند که اغلب به یک رابطه توانی با نرخ کرنش نوک ترک ($\dot{\epsilon}_{ct}$) مطابق با رابطه (۲-۱) ساده می‌شود:

$$\frac{da}{dt} = k_a (\dot{\epsilon}_{ct})^m \quad (2-1)$$

در این معادله، m پارامتر نرخ منفعل سازی است که به ماده و محیط بستگی دارد و k_a ثابت نرخ اکسیداسیون است [۷۵]. این مدل به دلیل ساده‌انگاری بیش از حد، عدم در نظر گرفتن صریح متغیرهایی مانند دما یا pH، نادیده گرفتن اثرات مکانیکی-شیمیایی و نقض بالقوه قانون پایستگی بار، مورد انتقاد قرار گرفته است [۷۶-۷۸].

-
- 1 Slip oxidation
 - 2 Slip dissolution
 - 3 Film rupture
 - 4 Ford-Andresen
 - 5 Passive
 - 6 Faraday's law



شکل ۲-۹- بیان کلی مکانیسم پارگی فیلم برای SCC [۷۹].

۲-۲-۴- مدل نرخ کرنش نوک ترک^۱

از آنجا که مدل اکسیداسیون لغزش اساساً به نرخ کرنش نوک ترک ($\dot{\epsilon}_{ct}$) وابسته است، تعیین دقیق این پارامتر برای مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده ضروری است. این مکانیسم، که به عنوان مدل شوجی (Shoji) یا FRI یاد می‌شود [۸۰-۸۲]، با هدف ارائه یک فرمول دقیق و مبتنی بر مکانیک برای $\dot{\epsilon}_{ct}$ ارائه شده است. این مدل از بیان میدان مجانبی^۲ (مثلاً میدان مجانبی گائو-هوانگ^۳ [۸۳] یا میدان مجانبی هاجینسون-رایس-روزنگرن^۴ [۸۴، ۸۵]) برای مواد سخت‌شونده کرنشی^۵ استفاده می‌کند تا پروفیل کرنش پلاستیک نزدیک نوک ترک را تعریف کند. پس از آن نرخ کرنش از گرادین کرنش ایجاد شده هنگام انتشار ترک به دست می‌آید. با گنجاندن عبارت مشتق‌شده از میدان مجانبی برای $\dot{\epsilon}_{ct}$ در چارچوب اکسیداسیون لغزش، یک معادله CGR جامع‌تر تشکیل می‌شود که عوامل الکتروشیمیایی، مواد و مکانیکی را به هم مرتبط می‌کند. یکی از معایب اصلی این مدل، پیچیدگی آن است که تحلیل و محاسبه

1 Crack tip strain rate model

2 Asymptotic

3 Gao-Hwang

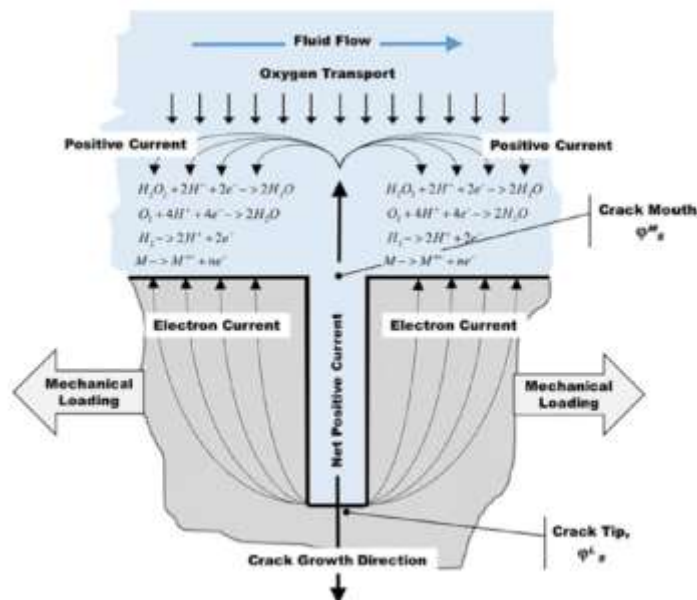
4 Hutchinson-Rice-Rosengren

5 Strain-hardening

را چالش برانگیز می‌کند. تعیین دقیق پارامترهای متعدد مورد نیاز اغلب دشوار است، که می‌تواند کاربرد مستقیم مدل را در زمینه‌های مهندسی محدود کند [۲۶].

۲-۵- مدل شکست محیطی همبسته (CEFM)

این مدل که توسط مک‌دونالد و همکاران^۲ [۸۶] توسعه داده شده است، بر پایه مکانیسم اکسیداسیون لغزش ساخته شده است، اما تأکید زیادی بر اتصال الکتروشیمیایی بین فضای داخلی ترک و سطح خارجی ماده دارد. این مدل بر پایه فرضیه هوادهی تفاضلی^۳ درون ترک را به عنوان آند موضعی و سطوح خارجی را به عنوان کاتد موضعی در نظر می‌گیرد. یک اصل اساسی، اصل پایستگی بار است که مستلزم آن است که جریان مثبت خالص جاری از دهانه ترک باید با واکنش‌های کاتدی خالص که در سطوح خارجی رخ می‌دهند، متعادل شود (شکل ۲-۱۰).



شکل ۲-۱۰- همبستگی محیط‌های داخلی و خارجی ترک، آند موضعی در داخل ترک وجود دارد، در حالی که کاتد موضعی روی سطح در معرض آن قرار دارد [۸۷].

در این مدل، CGR در یک فرآیند دو مرحله‌ای تعیین می‌شود. ابتدا، پتانسیل خوردگی الکتروشیمیایی روی سطح بیرونی محاسبه می‌شود، که سپس امکان تخمین CGR را با استفاده از قانون فارادی فراهم

1 Coupled Environment Fracture Model (CEFM)

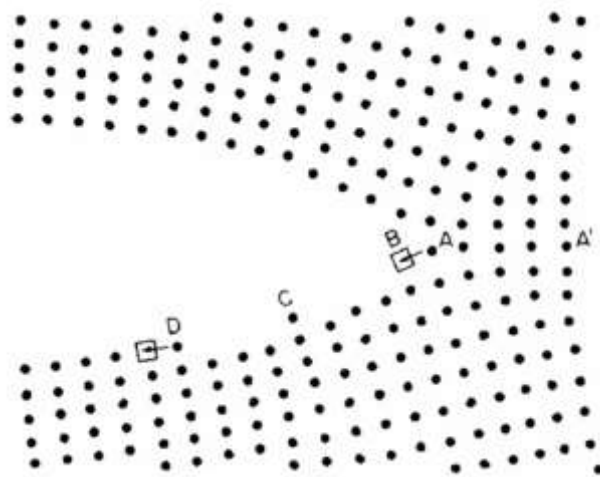
2 Macdonald et al.

3 Differential aeration hypothesis

می‌کند. این امر مستلزم حل معادله لاپلاس برای تعیین توزیع پتانسیل است [۸۸]. این مدل به دلیل ناتوانی در توضیح اثرات خاص آنیون‌های ناخالصی مختلف در سطح رسانایی یکسان و اتکای آن به گرادیان‌های پتانسیل به تنهایی برای انتقال یونی در داخل ترک، مورد چالش و انتقاد قرار گرفته است [۸۹].

۲-۲-۶- مکانیسم تحرک سطحی (SMM)

SMM که توسط گالویل معرفی شد، مکانیسم جایگزینی برای پیش‌روی ترک ارائه می‌دهد که مبتنی بر انحلال نیست [۹۰، ۹۱]. در این مدل، رشد ترک زمانی رخ می‌دهد که اتم‌های نوک ترک تحت تنش بالا از طریق انتشار سطحی^۳ به نواحی با تنش کمتر انتقال پیدا می‌کنند، که به طور موثر ترک را با فاصله اتمی پیش می‌برد. این فرآیند توسط شبکه^۴ تحت تنش در نوک ترک که فضاهای خالی ایجاد شده توسط محیط را به دام می‌اندازد، هدایت می‌شود [۹۲، ۹۳] (شکل ۲-۱۱).



شکل ۲-۱۱- شرح مکانیسم ترک خوردگی ناشی از تحرک سطحی [۹۰].

در این مدل، CGR به صورت تابعی از ضریب خود-انتشاریابی^۵ سطحی (D_s)، تنش سطحی الاستیک در نوک ترک (σ) و دمای مطلق (T) به صورت رابطه زیر بیان می‌شود:

1 Surface Mobility Mechanism (SMM)

2 Galvele

3 Surface diffusion

4 lattice

5 self-diffusion coefficient

$$\frac{da}{dt} = \frac{D_s}{L} \left[e^{\frac{\sigma a^3}{KT}} - 1 \right] \quad (2-2)$$

در رابطه بالا L فاصله نفوذ فضاهای خالی (معمولاً 10^{-8} m)، a قطر اتمی و k ثابت بولتزمن است [۹۴]. SMM به دلیل تخمین بیش از حد CGR در فلزات شکل‌پذیر خاص به میزان چندین برابر و همچنین به دلیل اینکه محاسبه CGR آن از نظر مفهومی مشابه نرخ تغییر شکل خزش آست، مورد انتقاد قرار گرفته است [۹۵-۹۷].

۲-۲-۷- مکانیسم تردی هیدروژنی^۳ (HE)

مدل تردی هیدروژنی پیشنهاد می‌کند که جذب هیدروژن اتمی به درون شبکه فلزی، علت اصلی ترک خوردگی است. هیدروژن می‌تواند به عنوان یک محصول کاتدی واکنش خوردگی در نوک ترک تولید شود. اتم‌های هیدروژن، کوچک و بسیار متحرک هستند که به آنها اجازه می‌دهند تا در فلز پخش شوند و در مکان‌هایی با تمرکز تنش بالا، مانند ناحیه جلوی نوک ترک، تجمع یابند [۹۸]. وجود هیدروژن در شبکه می‌تواند با تضعیف پیوندهای بین اتمی و تسهیل حرکت نابجایی‌ها باعث پدیده انعطاف‌پذیری موضعی تقویت‌شده با هیدروژن^۴ (HELP) شود، و یا با افزایش تشکیل فازهای هیدرید ترد، شکل‌پذیری و چقرمگی شکست^۵ ماده را به طور قابل توجهی کاهش دهد و باعث پدیده گسیختگی افزایش یافته با هیدروژن^۶ (HEDE) شود [۹۹]. این تردی موضعی، تنش مورد نیاز برای پیشرفت ترک را کاهش می‌دهد و منجر به پیش‌روی IGSCC می‌شود.

۲-۲-۸- هم‌افزایی ساز و کارها

اگرچه مکانیسم‌های اولیه IGSCC اغلب برای شفاف‌سازی به‌طور جداگانه مورد بحث قرار می‌گیرند، اما در واقعیت، آن‌ها به‌ندرت با یکدیگر ناسازگار هستند. اغلب اوقات، آن‌ها به‌صورت هم‌افزایی عمل می‌کنند، به‌طوری که یک فرآیند، فرآیند دیگر را در یک حلقه بازخورد پیچیده تسهیل می‌کند و انتشار ترک را تسریع می‌کند. برای مثال، یک رویداد انحلال لغزش که لایه منفعل را پاره می‌کند، نه تنها باعث

1 Ductile

2 Creep

3 Hydrogen Embrittlement (HE)

4 Hydrogen Enhanced Localized Plasticity (HELP)

5 Fracture toughness

6 Hydrogen Enhanced Decohesion (HEDE)

پیشروی کوچک ترک از طریق انحلال آندی^۱ می‌شود، بلکه یک سطح تازه ایجاد می‌کند که در آن واکنش کاتدی می‌تواند هیدروژن تولید کند. این هیدروژن سپس می‌تواند جلوتر از نوک ترک پخش شود و باعث تردی هیدروژنی مرز دانه شود. سپس ماده ترد شده به راحتی توسط تنش موضعی شکسته می‌شود و منجر به پیشروی ترک بزرگتری نسبت به آنچه هر یک از مکانیسم‌ها به تنهایی می‌توانند ایجاد کنند، می‌شود. این هم‌افزایی بین انحلال و تردی، عامل کلیدی در سرعت انتشار سریع مشاهده شده در بسیاری از سیستم‌های IGSCC در نظر گرفته می‌شود. سهم نسبی هر مکانیسم می‌تواند بسته به ماده، محیط و شرایط بارگذاری تغییر کند، و توسعه یک مدل پیش‌بینی کاملاً کوپل شده، مانند مدل موجود در این پایان‌نامه، را برای درک ماهیت واقعی پدیده ضروری می‌کند [۱۰۴-۱۰۰].

۲-۳- مدل‌سازی ناحیه چسبنده شکستگی

برای مدل‌سازی دقیق فرآیند شکست مکانیکی در پدیده‌هایی مانند IGSCC، فراتر رفتن از چارچوب‌های کلاسیک ضروری است. مکانیک شکست الاستیک خطی، علیرغم اهمیت تاریخی خود، با محدودیت‌های جدی در توصیف شکست در موادی که دارای ناحیه فرآیند قابل توجهی در نوک ترک هستند یا در مواردی که تخریب با کمک عوامل محیطی رخ می‌دهد، مواجه است. از آنجایی که شکست در IGSCC یک فرآیند جداشدگی تدریجی است نه یک رویداد آنی، و همچنین به شدت تحت تأثیر عوامل شیمیایی قرار دارد، رویکرد پیشرفته‌تری مورد نیاز است. در این بخش، مدل‌سازی ناحیه چسبنده به عنوان یک چارچوب قدرتمند برای غلبه بر این محدودیت‌ها معرفی می‌شود. با توصیف فرآیند شکست از طریق قانون کشش-جداشدگی، این مدل امکان شبیه‌سازی واقع‌گرایانه‌تر از جداشدگی تدریجی مواد را فراهم می‌کند و همچنین امکان ادغام اثرات شکنندگی ناشی از محیط را فراهم می‌کند.

۲-۳-۱- محدودیت‌های مکانیک شکست الاستیک خطی (LEFM)

مکانیک شکست کلاسیک، به ویژه مکانیک شکست الاستیک خطی (LEFM)، در درک رفتار ترک‌ها در مواد ترد نقش مهمی داشته است. LEFM حالت تنش پیش روی یک ترک نوک‌تیز را با استفاده از فقط یک پارامتر، ضریب شدت تنش^۳ (K)، مشخص می‌کند و شکست را هنگامی که K به یک مقدار بحرانی، چقرمگی شکست (K_{IC})، می‌رسد، پیش‌بینی می‌کند. با این حال، LEFM یک ترک نوک‌تیز

1 Anodic dissolution

2 Linear Elastic Fracture Mechanics (LEFM)

3 Stress intensity factor

ریاضیاتی را فرض می‌کند و در درجه اول برای موادی کاربرد دارد که ناحیه فرآیند^۱- ناحیه تغییر شکل غیرالاستیک و تخریب مواد پش روی نوک ترک - در مقایسه با اندازه ترک و ابعاد اجزاء بسیار کوچک باشد.

در بسیاری از سناریوهای دنیای واقعی، از جمله IGSCC، این فرض نقض می‌شود. فرآیند تخریب آنی نیست، بلکه به تدریج در یک منطقه محدود رخ می‌دهد. علاوه بر این، LEFM ذاتاً نمی‌تواند تأثیر گونه‌های شیمیایی بر فرآیند شکست را در نظر بگیرد. برای غلبه بر این محدودیت‌ها، رویکرد ماهرانه‌تری مورد نیاز است که منجر به کاربرد گسترده مدل‌های ناحیه چسبنده (CZM) شده است [۱۰۵].

۲-۳-۲- مفهوم مدل ناحیه چسبنده (CZM)

مدل ناحیه چسبنده، که اولین بار توسط بارنبلات^۲ [۱۰۶] برای شکست ترد و توسط داگدیل^۳ [۱۰۷] برای شکست به دنبال تسلیم پلاستیک مفهوم‌سازی شد، میدان تنش تکینه^۴ LEFM را با قانون کشش-جداشدگی (TSL) جایگزین می‌کند که فرآیند تدریجی جداشدگی مواد در یک سطح مشترک را توصیف می‌کند. TSL رابطه‌ای بین کشش (تنش) اعمال شده در سطح مشترک^۵ و جداشدگی (جهش جابجایی)^۶ بین سطوح آن، در حالت‌های عمودی^۷ و مماسی^۸ را تعریف می‌کند. این رویکرد به طور مؤثر فرآیند شکست را در یک قانون رفتاری برای خود سطح مشترک جای می‌دهد.

مزیت کلیدی CZM توانایی آن در مدل‌سازی کل فرآیند شکست، از شروع تا پیش‌روی، در یک چارچوب یکپارچه است. انرژی اتلاف شده در طول شکست، بخش ذاتی مدل است که با مساحت زیر منحنی کشش-جداشدگی نشان داده می‌شود، که به عنوان انرژی شکست چسبنده^۹ تعریف می‌شود. این چارچوب به ویژه برای مسائلی که عوامل شیمیایی یا محیطی باعث کاهش مقاومت ماده می‌شوند، مناسب است، زیرا پارامترهای TSL (کشش بیشینه، جدایش بحرانی و انرژی شکست) را می‌توان به صورت تابعی از متغیرهای محیطی مانند غلظت مواد شیمیایی در نظر گرفت [۱۵، ۶].

1 Process zone

2 Barenblatt

3 Dugdale

4 Singular

5 Interface

6 Displacement jump

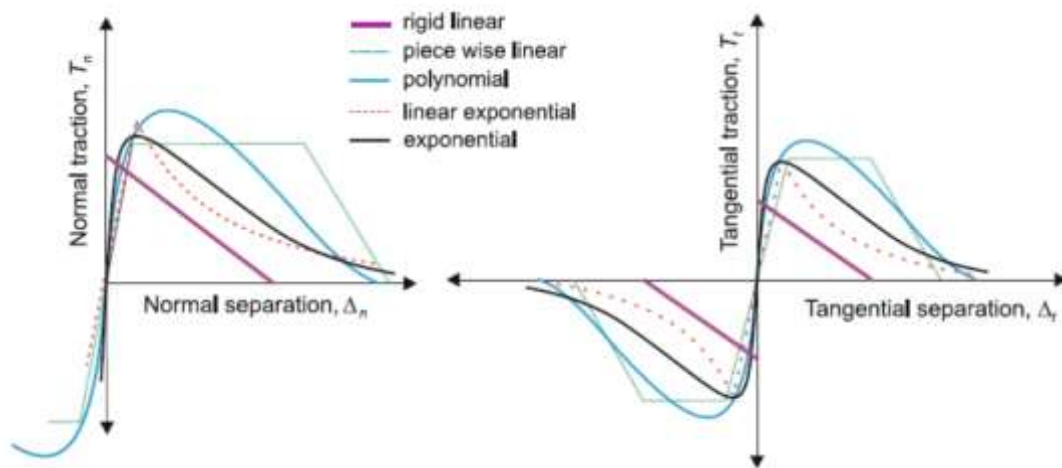
7 Normal

8 Tangential

9 Cohesive fracture energy

۲-۳-۳- قانون کشش-جداشدگی (TSL)

تا کنون شکل‌های مختلفی برای TSL در مدل‌سازی رفتارهای مختلف مواد پیشنهاد شده است. از جمله این رفتارهای متفاوت پیشنهاد شده می‌توان به دوخطی^۱ (مثلی)، سه خطی^۲، دوزنقه‌ای^۳، چندجمله‌ای^۴ و نمایی^۵ اشاره کرد (شکل ۲-۱۲). برای مدل‌سازی مسائل متفاوت (مانند جدا شدن لایه‌های کامپوزیت‌ها، مسائل ضربه، شکست مواد ترد و ترک خوردگی مواد شکل‌پذیر) می‌توان از شکل‌های متفاوت TSL استفاده کرد. یک نکته کلیدی در کاربرد مدل‌های ناحیه چسبنده انتخاب شکل TSL است، زیرا شکل تعریف‌شده آن که به شدت به مسئله مورد تحلیل بستگی دارد می‌تواند به طور قابل توجهی بر نتایج شبیه‌سازی تأثیر بگذارد.



شکل ۲-۱۲- بیان عمومی قوانین مختلف ناحیه چسبنده برای بارگذاری سطح مشترک [۱۰۸].

آلفانو^۸ [۱۰۹] با بررسی مسائل متفاوت در حالت‌های عمودی خالص و مماسی خالص، و با یکسان نگه‌داشتن پارامترهای کلیدی بین TSLهای متفاوت، یعنی سختی اولیه، کشش پیشینه و انرژی شکست مربوطه، به مقایسه پاسخ مسائل مقدار مرزی تحت استفاده از TSLهای دوخطی، خطی-سه‌موی^۹، نمایی

-
- 1 Bilinear
 - 2 Trilinear
 - 3 Trapezoidal
 - 4 Polynomial
 - 5 Exponential
 - 6 Composites delamination
 - 7 Impact
 - 8 Alfano
 - 9 Linear-parabolic

و دوزنقه‌ای برای رفتار سطح مشترک پرداخت. بر اساس این پژوهش، نتیجه‌گیری اصلی این است که اهمیت شکل TSL به مسئله مقدار مرزی خاص مورد بررسی، به ویژه به نسبت بین سختی ماده توده‌ای^۱ و چقرمگی فصل مشترک، بستگی دارد. همچنین در این پژوهش بیان شد که: ۱- برای سازه‌های با صلبیت کمتر، مانند یک تیر گیردار دوگانه^۲ (DCB)، با فرض اینکه مش بندی به اندازه کافی ریز شده باشد، پاسخ عملاً مستقل از شکل TSL است. ۲- برای سازه‌های بسیار صلب، مانند نمونه فشرده فولادی، با اختلاف تا ۱۵٪ در حداکثر بار پیش‌بینی شده، شکل TSL تأثیر قابل توجهی داشت؛ این تأثیر در نزدیکی بار بیشینه قابل توجه بود. ۳- همچنین شکل TSL بر عملکرد عددی و دقت تقریب تأثیر می‌گذارد؛ قانون دوزنقه‌ای از نظر پایداری و همگرایی بدترین عملکرد را داشت و قانون نمایی بهترین تقریب را ارائه داد، در حالی که قانون دوخطی بهترین تعادل را بین هزینه محاسباتی و دقت ارائه داد.

در مقابل، شاید و براکس^۳ [۱۱۰] تأثیر مهم و پایداری از شکل TSL را بر تحلیل‌های رشد ترک در مواد انعطاف‌پذیر نشان دادند. آن‌ها با مقایسه TSLهای چندجمله‌ای، نمایی و دو TSL غیرمتعارف تنش ثابت و نرم شوندگی درجه ۳، دریافتند که TSL با بخش تنش ثابت غالب، بیشترین مقاومت به ترک را پیش‌بینی می‌کند، در حالی که توابع چندجمله‌ای و نمایی مقادیر مقاومت مشابه و کمتری را به دست آوردند. شاید مهم‌ترین یافته کار آن‌ها به قابلیت انتقال‌پذیری پارامترهای چسبنده مربوط باشد. نویسندگان نشان دادند که هنگام تغییر هندسه مسئله، انتقال‌پذیری پارامترها بین TSLهای مختلف تضمین نمی‌شود. در آزمایش عددی خود، آن‌ها پارامترهایی را برای یک قانون چندجمله‌ای و یک قانون تنش ثابت تنظیم کردند تا رفتار یک نمونه کشش فشرده^۴ (CT) را بازتولید کنند. با این حال، هنگامی که این TSLها و پارامترهای تنظیم‌شده مربوط به آن‌ها برای شبیه‌سازی یک نمونه کشش با ترک میانی^۵ (MT) استفاده شد، منحنی‌های بار-جابجایی حاصل به طور قابل توجهی متفاوت بودند. این موضوع یک چالش اساسی را برجسته می‌کند: پارامترهای چسبنده که برای یک TSL و هندسه خاص تنظیم شده‌اند، در صورت تغییر شکل TSL یا هندسه نمونه، ممکن است معتبر نباشند.

یکی دیگر از مواردی که در مدل سازی ناحیه چسبنده تحت تأثیر شکل انتخابی TSL می‌باشد، پاسخ مدل در شرایط حالت ترکیبی^۶، یعنی حضور همزمان جداشدگی عمودی و جدا شدگی مماسی، می‌باشد. به طور معمول در مسائل مقدار مرزی مورد بررسی با CZM، حالت عمودی خالص و حالت مماسی

1 Bulk material

2 Double Cantilever Beam (DCB)

3 Scheider and Brocks

4 Compact Tension (CT)

5 Middle-cracked Tension (MT)

6 Mixed mode

خالص جداگانه بررسی می‌شوند و در این مسائل TSL های جداگانه‌ای برای حالت عمودی و مماسی در نظر گرفته می‌شود. از این فرض در بررسی مسائل مقدار مرزی‌ای که باعث ایجاد حالت ترکیبی می‌شوند نیز می‌توان استفاده کرد و کشش عمودی را بدون تأثیر از جداسازی مماسی، و کشش مماسی را بدون تأثیر از جداسازی عمودی در نظر گرفت [۱۱۱]. در این رویکرد غیر جفت‌شده نرخ آزادسازی انرژی^۱ (ERR) در حالت‌های عمودی و مماسی به عنوان مساحت زیر مسیر طی شده در منحنی‌های TSL مربوطه شناسایی می‌شوند و ERR کل، مجموع ERR در حالت‌های عمودی و مماسی است. در این رویکرد معیار شکست بر اساس انرژی است که می‌تواند باعث افت ناگهانی در کشش‌ها قبل از رسیدن به جداسازی بحرانی شود [۱۱۲].

در نقطه مقابل این رویکرد، رویکرد جفت‌شده می‌باشد که تأثیر جداسازی عمودی و مماسی همزمان در کشش عمودی و مماسی دیده می‌شود. در رویکرد جفت‌شده شکل TSL مورد استفاده از آنجا اهمیت پیدا می‌کند که برای شکل‌های چندجمله‌ای و نمایی، مدل‌های ریاضیاتی صریح وجود دارد که بر اساس انرژی پتانسیل تعریف شده‌اند و تأثیر جداسازی عمودی و مماسی را همزمان در کشش عمودی و مماسی محاسبه شده در نظر می‌گیرند، مانند مدل چندجمله‌ای پارک-پائولینو-روزلر^۲ [۱۱۳] و مدل نمایی ژو-نیدلمن^۳ [۱۱۴]؛ اما برای استفاده از TSL های جفت‌شده دوخطی [۱۱۲] و دوزنقه‌ای [۱۰۵] عبارت صریح ریاضیاتی موجود نمی‌باشد و باید از پارامترهای جداسازی و کشش بدون بعد (نرمال شده نسبت به مقادیر بحرانی این پارامترها) برای تشکیل TSL استفاده کرد.

یکی از پرکاربردترین TSL ها برای مدل‌سازی شکستگی در سطح مشترک، قانون نمایی‌ای است که توسط ژو و نیدلمن [۱۱۴] توسعه داده شده است. این مدل از یک پتانسیل ترمودینامیکی مشتق شده است که ثابت ترمودینامیکی را تضمین می‌کند و توصیف قوی برای جداسازی عمودی و مماسی ارائه می‌دهد که توانایی تحلیل مسائل مقدار مرزی حالت مختلط را دارا است.

در این مدل، پتانسیل چسبندگی، Φ ، به عنوان تابعی از جدایی‌های عمودی Δ_n و مماسی Δ_t تعریف می‌شود:

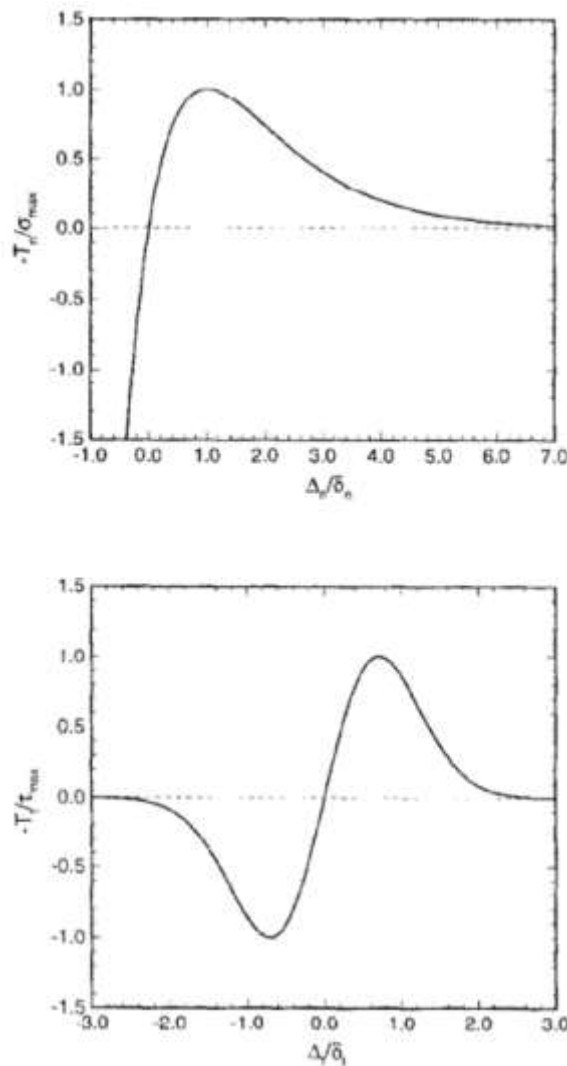
$$\Phi(\Delta_n, \Delta_t) = \left[\phi_n - \phi_n \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n}\right) \left(1 + \frac{\Delta_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2}\right) \right] \quad (۳-۲)$$

1 Energy Release rate (ERR)

2 Park-Paulino-Roesler

3 Xu-Needleman

که در آن Φ_n کار مشخصه جداشدگی است و δ_t و δ_n به ترتیب مقیاس‌های طول مشخصه برای جداسازی عمودی و مماسی هستند. سپس کشش‌های نرمال (T_n) و مماسی (T_t) با مشتق‌گیری از پتانسیل نسبت به جداسازی‌های مربوطه به دست می‌آیند (شکل ۲-۱۳).



شکل ۲-۱۳- مدل ژو-نیدلمن برای حالات خالص عمودی (بالا) و مماسی (پایین) [۱۱۴].

این فرمول‌بندی، توصیفی پیوسته و روان از فرآیند جدایش چسبندگی ارائه می‌دهد که آن را از نظر عددی پایدار و از نظر فیزیکی نمایانگر شکست تدریجی پیوند که در طول شکست رخ می‌دهد، می‌کند. توانایی آن در ترکیب با تخریب محیطی با تبدیل پارامترهایی مانند Φ_n به تابعی از غلظت شیمیایی موضعی، آن را به انتخابی ایده‌آل برای مطالعه حاضر تبدیل می‌کند [۶، ۱۴، ۱۱۵].

۲-۴- مدل سازی انتقال جرم و انتشار

جنبه شیمیایی IGSCC توسط انتقال گونه‌های خورنده از محیط خورنده به نوک ترک و در امتداد مسیر مرز دانه‌های مستعد کنترل می‌شود. این فرآیند اساساً یک مسئله انتشار است، اما مسئله‌ای است که به طور قابل توجهی تحت تأثیر وضعیت تنش مکانیکی موضعی قرار دارد [۶، ۱۴].

۲-۴-۱- قوانین فیک به عنوان مدل سازی انتشار

اصول بنیادی مدل سازی انتشار توسط فیک پایه‌گذاری شد که به عنوان قوانین فیک شناخته می‌شوند. این قوانین حرکت ذرات را از ناحیه‌ای با غلظت بالاتر به ناحیه‌ای با غلظت پایین‌تر توصیف می‌کنند.

قانون اول فیک انتشار حالت یکنواخت را توصیف می‌کند که در آن پروفیل غلظت با گذشت زمان تغییر نمی‌کند. این معادله بیان می‌کند که شار انتشار (J) مستقیماً با منفی گرادیان غلظت (∇C) متناسب است، و ثابت تناسب، ضریب انتشاریابی (D) است، رابطه (۲-۴):

$$J = -D\nabla C \quad (2-4)$$

اگرچه این رویکرد برای سناریوهای ساده و مستقل از زمان مفید است، IGSCC به صورت ذاتی یک فرآیند گذرا^۱ است. غلظت گونه‌های خورنده در نوک ترک با گسترش ترک و تخریب ماده تغییر می‌کند. بنابراین، یک فرمول‌بندی وابسته به زمان مورد نیاز است.

قانون دوم فیک این انتشار غیریکنواخت را بررسی می‌کند. این قانون که از قانون اول و اصل پایستگی جرم مشتق شده است، نرخ تغییر غلظت در طول زمان را به توزیع مکانی غلظت مرتبط می‌کند:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla C) \quad (2-5)$$

1 Diffusion

2 Adolf Fick

3 Concentration

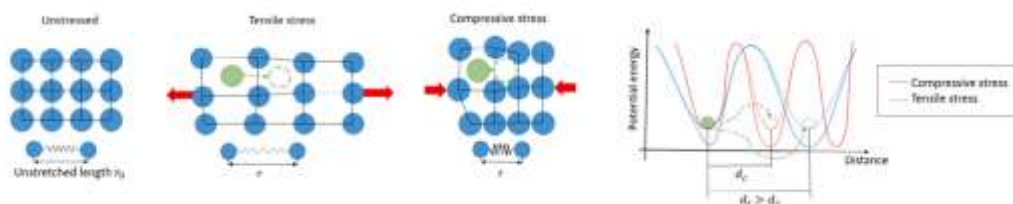
4 Transient

این معادله دیفرانسیل جزئی^۱ مبنای مدل‌سازی انتقال وابسته به زمان گونه‌های خورنده در کار حاضر را تشکیل می‌دهد. این معادله امکان شبیه‌سازی چگونگی تکامل پروفیل غلظت در امتداد مرز دانه را به عنوان تابعی از زمان و شرایط مرزی متغیر در نوک ترک فراهم می‌کند [۱۱۶].

۲-۴-۲- انتشار به کمک تنش^۲

مدل استاندارد فیک فرض می‌کند که انتشار صرفاً توسط گرادیان غلظت هدایت می‌شود. با این حال، حجم زیادی از کارهای نظری و تجربی نشان داده‌اند که حالت تنش موضعی می‌تواند به طور قابل توجهی بر شار انتشار تأثیر بگذارد، پدیده‌ای که به عنوان انتشار به کمک تنش شناخته می‌شود. این یک جزء حیاتی از همبستگی شیمیایی-مکانیکی در IGSCC است.

تأثیر تنش بر انتشار را می‌توان از طریق تأثیر آن بر پتانسیل شیمیایی گونه‌های منتشرشونده درک کرد. تنش هیدرواستاتیک کششی، حجم آزاد شبکه کریستالی را افزایش می‌دهد، مانع انرژی فعال‌سازی برای جهش‌های اتمی را کاهش می‌دهد و در نتیجه انتشارپذیری را افزایش می‌دهد. برعکس، تنش فشاری باعث انتشار کندتر می‌شود. این مشاهدات به صورت عمده توسط دینامیک مولکولی، همانطور که به صورت شماتیک در شکل (۲-۱۴) نشان داده شده است، فرضیه‌سازی شدند. این شکل نشان می‌دهد که چگونه انرژی‌های پتانسیل تحت تأثیر تنش‌های همگن قرار می‌گیرند. در اثر تنش کششی فاصله شبکه‌ای بزرگتری حاصل می‌شود که منجر به پرش اتمی بزرگتری می‌شود و در مورد تنش فشاری همگن، برعکس. این امر منجر به شار خالص اتم‌های محلول^۳ از مناطقی با تنش هیدرواستاتیک پایین‌تر به مناطقی با تنش هیدرواستاتیک بالاتر می‌شود [۱۱۷].



شکل ۲-۱۴- نمایش اثر تنش‌های همگن (کششی/فشاری) بر فواصل جهش و انرژی‌های پتانسیل [۱۱۸].

1 Partial differential equation

2 Stress assisted diffusion

3 Solute

این پدیده به طور گسترده در زمینه‌های مختلف، مانند تردی هیدروژنی در فلزات، مشاهده شده است، جایی که هیدروژن در ناحیه حداکثر تنش هیدرواستاتیک قبل از نوک ترک تجمع می‌یابد [۱۱۹]. برای در نظر گرفتن این موضوع، معادله شارانتشار کلاسیک اصلاح شده است تا شامل یک عبارت وابسته به گرادیان تنش هیدرواستاتیک ($\nabla\sigma_h$) باشد:

$$J = -D(\nabla C - \frac{CV_m}{RT}\nabla\sigma_h) \quad (۶-۲)$$

که در آن V_m حجم مولی جزئی حل‌شونده، R ثابت گاز و T دمای مطلق است. این فرمول‌بندی که به اشکال مختلف در مطالعات متعدد پیاده‌سازی شده است [۱۲۰]، محور مدل توسعه‌یافته در این پایان‌نامه است. این فرمول‌بندی، مکانیسمی را برای تأثیر مستقیم میدان تنش مکانیکی بر میدان شیمیایی فراهم می‌کند و نیمی از مسئله همبسته کامل را تشکیل می‌دهد.

۲-۵- مدل‌های همبسته شیمیایی-مکانیکی در شکستگی

با توجه به ماهیت ذاتاً چندوجهی IGSCC، مدل‌های عددی به تدریج تکامل یافته‌اند تا تعامل بین میدان‌های مکانیکی و شیمیایی را بهتر به تصویر بکشند. این مدل‌ها را می‌توان به طور کلی بر اساس سطح همبستگی که در خود جای می‌دهند، طبقه‌بندی کرد.

۲-۵-۱- نقاط قوت و ضعف رویکردهای مختلف

مدل‌های غیرهمبسته [۲۲، ۲۳، ۳۰] ساده‌ترین رویکرد را نشان می‌دهند. در حالی که آنها می‌توانند تجزیه و تحلیل دقیقی از یک پدیده واحد، مانند توزیع تنش در اطراف نوک ترک در غیاب خوردگی ارائه دهند، ناتوانی آنها در پیش‌بینی اثرات جفت‌شده، آنها را برای شبیه‌سازی واقع‌بینانه IGSCC نامناسب می‌کند. آنها به صورت اساسی در به تصویر کشیدن ماهیت هم‌افزایی پدیده شکست می‌خورند و منجر به پیش‌بینی‌های بیش از حد ساده و اغلب نادرست می‌شوند.

مدل‌های کوپل شده یک طرفه [۱۷-۲۱، ۲۴، ۲۵] با در نظر گرفتن تأثیر یک‌طرفه، بهبودهایی را ارائه می‌دهند. به عنوان مثال، یک میدان تنش مکانیکی از پیش محاسبه‌شده می‌تواند به عنوان ورودی برای یک مدل انتشار برای شبیه‌سازی انتشار به کمک تنش استفاده شود. با این حال، این مدل‌ها به صورت ذاتی محدود هستند زیرا مکانیسم بازخورد حیاتی را نادیده می‌گیرند: با پیشرفت خوردگی و تخریب

ماده، وضعیت تنش موضعی و مقاومت در برابر شکست به صورت پویا تغییر می‌کنند. این فرض استاتیکی می‌تواند منجر به اشتباهات قابل توجهی در پیش‌بینی رشد ترک در طول زمان شود.

مدل‌های همبسته کامل [۶، ۱۴-۱۶، ۲۷، ۲۸]، واقع‌گرایانه‌ترین رویکرد فیزیکی را نشان می‌دهند. آن‌ها با حل همزمان معادلات مکانیکی و شیمیایی، تعامل پویا و دو طرفه که IGSCC را تعریف می‌کند، به تصویر می‌کشند. در این مدل‌ها، گرادیان‌های تنش، انتشار را هدایت می‌کنند و غلظت حاصل از گونه‌های خورنده، به نوبه خود، خواص چسبندگی ماده را کاهش می‌دهد، میدان تنش را تغییر می‌دهد و رشد بیشتر ترک را تحریک می‌کند. اگرچه این رویکرد از نظر محاسباتی دشوار است، اما برای شبیه‌سازی دقیق ماهیت پیچیده و وابسته به زمان فرآیند ترک خوردگی ضروری است.

۲-۶- خلاصه و شکاف تحقیقاتی

ادبیات مرور شده پیشرفت آشکاری را به سمت مدل‌های یکپارچه‌تر و فیزیکی‌تر IGSCC نشان می‌دهد. به طور گسترده اذعان شده است که این پدیده نتیجه تعاملات پیچیده و هم‌افزایی بین بارگذاری مکانیکی، ریزساختار مواد و شیمی محیط است. در حالی که رویکردهای عددی مختلفی توسعه یافته‌اند، اما دارای محدودیت‌های کلیدی هستند که هدف این تحقیق پرداختن به آنهاست.

مدل‌های فعلی اغلب با چالش‌هایی در زمینه ناپایداری‌های عددی مواجه هستند، به فرضیات ساده‌سازی‌شده در مورد شروع ترک متکی هستند و ممکن است داده‌های ریزساختاری دقیق را به طور کامل ادغام نکنند [۱۲۱]. بسیاری از مدل‌های موجود یا غیرهمبسته هستند یا فقط همبستگی یک‌طرفه دارند و نمی‌توانند بازخورد دینامیکی ضروری بین میدان‌های مکانیکی و شیمیایی را ثبت کنند. در بسیاری از مدل‌های همبسته کامل ارائه شده نیز کاستی‌هایی از جمله عدم وجود طرح اجرای مناسب برای ثبت بازخورد میدان‌ها در تعامل با یکدیگر، به خصوص عدم طرح مناسب برای در نظر گیری ترد شوندگی مواد دیده می‌شود. بسیاری از مدل‌های همبسته کامل فقط به کاهش استحکام ماده بسنده می‌کنند و کاهش شکل پذیری ماده در هنگام تعامل با میدان شیمیایی را در نظر نمی‌گیرند.

بر این مبنا، شکاف تحقیقاتی مشخص می‌شود که نیاز به یک مدل گذرا، کاملاً همبسته و مطمئن برای IGSCC است که در یک چارچوب امان محدود، و تطبیق‌پذیر برای مواد و شرایط مختلف، که با طرح اجرای مناسب برای تعامل میدان‌ها پیاده‌سازی شده باشد. ماهیت پویای IGSCC، که تحت تأثیر عوامل وابسته به زمان مانند نوسانات تنش و تخریب تدریجی مواد قرار دارد، یک رویکرد گذرا را ضروری می‌سازد. یک مدل کاملاً همبسته برای پیش‌بینی واقع‌بینانه شروع و رشد ترک با در نظر گرفتن

مکانیسم‌های بازخورد مورد نیاز است که در آن تنش بر خوردگی تأثیر می‌گذارد و خوردگی نیز به نوبه خود بر خواص مکانیکی ماده تأثیر می‌گذارد. توسعه چنین مدلی تمرکز اصلی این پایان‌نامه است که هدف آن ارائه ابزاری دقیق‌تر و قابل اعتمادتر برای پیش‌بینی عملکرد بلندمدت و یکپارچگی ساختاری اجزای مستعد IGSCC است.

فصل ۳: توسعه فرمول بندی حاکم

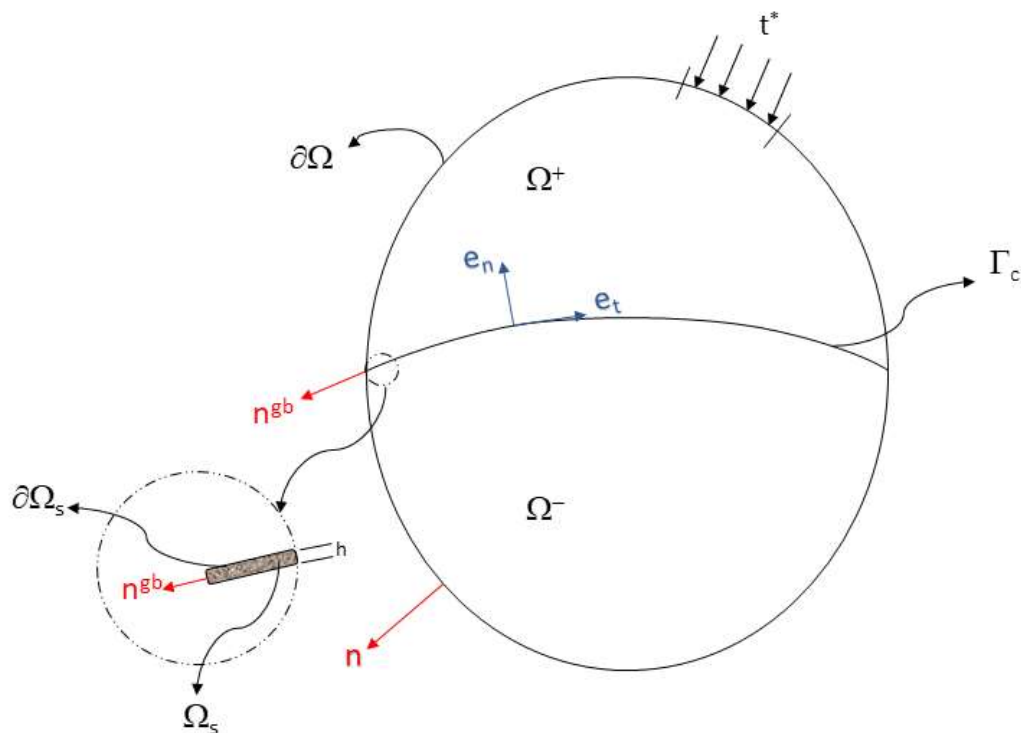
۳-۱- مقدمه

این فصل به تفصیل چارچوب نظری و عددی مدل شیمیایی-مکانیکی کاملاً همبسته برای شبیه‌سازی ترک خوردگی تنش بین دانه‌ای (IGSCC) را شرح می‌دهد. همانطور که در فصل ۲ بحث شد، IGSCC یک پدیده بصورت ذاتی همبسته است که در آن تخریب شیمیایی و شکست مکانیکی به صورت هم افزایی یکدیگر را تقویت می‌کنند. بنابراین، یک مدل پیش‌بینی‌کننده باید قادر به ثبت این تعامل دو طرفه باشد.

فرمول‌بندی ارائه شده در اینجا، یک ارتباط پویا و دو طرفه بین میدان تنش مکانیکی و میدان انتشار شیمیایی برقرار می‌کند. شکست مکانیکی در امتداد مرزهای دانه توسط یک مدل ناحیه چسبنده کنترل می‌شود که قادر به توصیف شروع و پیش‌روی ترک است و همچنین قادر به در نظر گرفتن اثرات تخریب ناشی از حضور گونه‌های خوردنده می‌باشد. همزمان، انتقال گونه‌های خوردنده در امتداد همین مرزهای دانه توسط یک قانون انتشار به کمک تنش مدل‌سازی می‌شود که تأثیر تنش مکانیکی بر انتقال یونی را در نظر می‌گیرد. در نهایت، کل این سیستم در یک چارچوب المان محدود (FE) گذرا پیاده‌سازی می‌شود تا ماهیت وابسته به زمان انتشار ترک، که یک جنبه حیاتی برای ارزیابی طول عمر قطعه است، را در نظر بگیرد. این فصل به بررسی معادلات حاکم، روابط ساختاری کوپل شده، پیاده‌سازی عددی از طریق روش المان محدود و طرح حل گذرا که اساس کد MATLAB توسعه داده شده برای این تحقیق را تشکیل می‌دهند، خواهد پرداخت.

۳-۲- معادلات حاکم

این مدل توسط دو مجموعه اولیه از معادلات دیفرانسیل جزئی تعریف می‌شود که میدان‌های مکانیکی و شیمیایی را در دامنه مربوطه توصیف می‌کنند. شماتیکی از دامنه میدان‌های مکانیکی و شیمیایی مسئله در شکل (۱-۳) نشان داده شده است.



شکل ۳-۱- بیان کلی مسئله مکانیکی شیمیایی و دامنه‌های مورد صدق.

همان طور که در شکل مشاهده می‌شود دامنه Ω توسط سطح مشترک Γ_c (interface) (متناظر با مرز بین دانه ای در مواد پلی کریستال) به دو قسمت Ω^+ و Ω^- (متناظر با توده دانه ها در مواد پلی کریستال) تقسیم می‌شود؛ $\mathbf{n}$ بیانگر بردار یکه عمود بر سطح در مرز بیرونی دامنه، $\partial\Omega$ ، می‌باشد و t^* بارگذاری خارجی بر روی مرز $\partial\Omega$ می‌باشد. همچنین e_n و e_t به ترتیب برابر بردار یکه های عمود و مماس بر راستای سطح مشترک می‌باشند. همچنین محدوده Ω_s که دامنه مورد صدق فرآیند انتشار می‌باشد به صورت هاشور خورده در شکل نشان داده شده است؛ یون‌های خورنده در این دامنه انتشار پیدا می‌کنند و این محدوده به فاصله $h/2$ از دو طرف سطح مشترک در نظر گرفته شده است و $\mathbf{n}^{gb}$ بیانگر بردار یکه عمود بر سطح مرز دامنه Ω_s می‌باشد. جزئیات بیشتر در رابطه با اندازه h و دامنه Ω_s در جلوتر بیان شده است.

میدان مکانیکی

رفتار مکانیکی مواد تابع اصل پایداری تکانه خطی است. با فرض شرایط شبه‌استاتیکی، که در آن اثرات اینرسی ناچیز است، معادله دیفرانسیل جزئی تعادل به صورت برابر با صفر بودن مجموع دیورژانس^۱ تانسور تنش کوشی (σ) و اثرات نیروهای حجمی بیان می‌شود:

$$\nabla \cdot \sigma + \rho b = 0 \quad \text{on } \Omega \quad (۱-۳)$$

میدان شیمیایی

میدان شیمیایی تابع اصل پایداری جرم برای گونه‌های خورنده است. شکل گذرای این قانون بیان می‌کند که نرخ تغییر غلظت (c) نسبت به زمان برابر با منفی دیورژانس بردار شار جرمی (J) است. این رابطه تضمین می‌کند که هرگونه تغییر موضعی در غلظت، ناشی از شار خالص به داخل یا خارج از یک حجم کنترل بی‌نهایت کوچک است:

$$\dot{c} = -\nabla^{gb} \cdot j \quad \text{on } \Omega_s \quad (۲-۳)$$

روابط (۳-۳) تا (۹-۳) بیان‌کننده معادلات رفتاری میدان مکانیکی و همچنین معادله شار میدان انتشار می‌باشند. همانطور که در بالاتر بیان شد دامنه Ω توسط سطح مشترک Γ_c به دو قسمت Ω^+ و Ω^- تقسیم می‌شود که در این قسمت‌ها رفتار مکانیکی ماده به صورت رفتار الاستیک در نظر گرفته می‌شود، (رابطه (۳-۳)).

$$\sigma = E : \epsilon \quad (۳-۳)$$

در سطح مشترک Γ_c رفتار به صورت رفتار ناحیه چسبنده (CZM) در نظر گرفته می‌شود؛ همان گونه که در فصل قبل بیان شد در CZM، رفتار ماده از قانون کشش-جداشدگی (TSL) تبعیت می‌کند؛ روابط (۴-۳) تا (۸-۳) مدل CZM ژو-نیدلمن همبسته شده با میدان شیمیایی، و روابط TSL متناظر با آن بیان شده است. همبستگی میدان مکانیکی با میدان شیمیایی به صورت تأثیر دادن افزایش غلظت

¹ Divergence

یون‌های خورنده در کاهش انرژی شکست المان‌های چسبنده و کاهش جداشدگی مشخصه انجام شده است. ترم در نظر گرفته شده برای همبستگی انرژی شکست المان‌های چسبنده در رابطه (۳-۴) به دلایل محاسباتی به صورت نمایی، به مانند روابط استفاده شده در مراجع [۶]، می‌باشد. برای همبستگی جداشدگی مشخصه و کاهش آن با افزایش غلظت یون‌های خورنده، در مراجع روابطی ضمنی پیشنهاد شده بود که نیازمند حل غیرخطی برای یافتن کشش‌های ایجاد شده تحت جداشدگی‌ها و غلظت‌های متفاوت بودند [۱۵، ۱۱۵]. در این پژوهش روابط (۳-۵ و ۳-۶) برای در نظر گیری اثر غلظت یون‌های خورنده بر شکل پذیری ماده و کاهش جداشدگی مشخصه با افزایش غلظت پیشنهاد و استفاده شده‌اند.

$$\begin{aligned} \phi(\Delta_n, \Delta_t, c) = & \left[\phi_n - \phi_n \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n(c)}\right) \left(1 + \frac{\Delta_n}{\delta_n(c)}\right) \exp\left(-\frac{\Delta_t^2}{\delta_t(c)^2}\right) \right] \\ & \times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp\left(-\frac{c}{c_{\text{char}}}\right)\right) \right] \end{aligned} \quad (۳-۴)$$

$$\delta_n(c) = \delta_{n_{\min}} + (\delta_{n_0} - \delta_{n_{\min}}) \exp\left(-\frac{c}{c_{\text{char}}}\right) \quad (۳-۵)$$

$$\delta_t(c) = \delta_{t_{\min}} + (\delta_{t_0} - \delta_{t_{\min}}) \exp\left(-\frac{c}{c_{\text{char}}}\right) \quad (۳-۶)$$

$$\begin{aligned} T_n(\Delta_n, \Delta_t, c) = & \frac{\partial \phi(\Delta_n, \Delta_t, c)}{\partial \Delta_n} \\ = & \left[\frac{\phi_n}{\delta_n(c)} \frac{\Delta_n}{\delta_n(c)} \exp\left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n(c)} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t(c)^2}\right) \right] \\ & \times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp\left(-\frac{c}{c_{\text{char}}}\right)\right) \right] \end{aligned} \quad (۳-۷)$$

$$T_t(\Delta_n, \Delta_t, c) = \frac{\partial \phi(\Delta_n, \Delta_t, c)}{\partial \Delta_t} \quad (۸-۳)$$

$$= \left[2 \frac{\phi_n}{\delta_t} \left(\frac{\Delta_t}{\delta_t} \right) \left(1 + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n(c)} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t(c)^2} \right) \right]$$

$$\times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{char}} \right) \right) \right]$$

معادله شار بیان شده در رابطه (۹-۳) نشان دهنده مقدار شار در راستای سطح مشترک (شبه یک بعدی) در محدوده Ω_s می‌باشد. در این رابطه شار، ناشی از دو علت گرادیان کشش عمودی و گرادیان غلظت بیان شده است.

$$\mathbf{j} = -D \nabla^{gb} c + D c \frac{V_{O_2}}{RT} \nabla^{gb} T_n(c) \quad (۹-۳)$$

در روابط بالا T_n کشش عمودی، T_t کشش مماسی، Δ_n جداشدگی عمودی، Δ_t جداشدگی مماسی، σ تانسور تنش کوشی، ε تانسور کرنش، E تانسور رفتاری الاستیک خطی مرتبه ۴ و همچنین ϕ_n ، δ_n و δ_t به ترتیب انرژی مشخصه و جداشدگی‌های مشخصه عمودی و مماسی می‌باشند؛ بیشینه کشش در حالت‌های عمودی و مماسی در این جداشدگی‌ها اتفاق می‌افتد. c چگالی عددی اکسیژن، D ضریب انتشار یابی اکسیژن در راستای سطح مشترک، $\mathbf{j}$ شار اکسیژن، V_{O_2} حجم مولی جزئی اکسیژن در فلز، R ثابت جهانی گازها و T دمای مطلق می‌باشند. همچنین از پارامتر غلظت مشخصه c_{char} برای محدود کردن تاثیر افزایش غلظت اکسیژن در کاهش انرژی شکست استفاده شده است. مقادیر این پارامترها از روی داده‌های آزمایشگاهی موجود در مراجع بدست می‌آید. در این روابط علامت ∇^{gb} به معنای گرادیان^۲ در راستای سطح مشترک می‌باشد.

در روابط (۴-۳) تا (۸-۳)، در هر حالت تغییر شکل، مولفه‌های Δ_n و Δ_t و در پی آن‌ها T_n و T_t ، نسبت به حالت تغییر شکل نیافته اولیه سطح مشترک سنجیده می‌شوند، (شکل ۲-۳). اگر A و B دو نقطه مادی در نظر گرفته شوند که در حالت اولیه سطح مشترک بر روی یکدیگر قرار دارند، A' و B' نقاط

1 Diffusivity

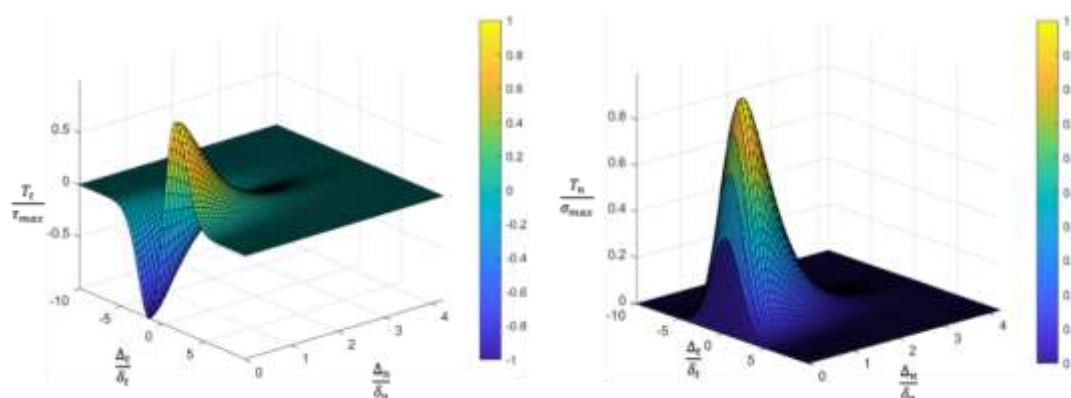
2 Gradient

متناظر با موقعیت آن‌ها را در حالت تغییر شکل یافته نشان می‌دهند. همان طور که در شکل ۳-۲ دیده می‌شود Δ_n و Δ_t مولفه های عمودی و مماسی جداشدگی (نسبت به راستای سطح مشترک) بین نقاط A' و B' را نشان می‌دهد.



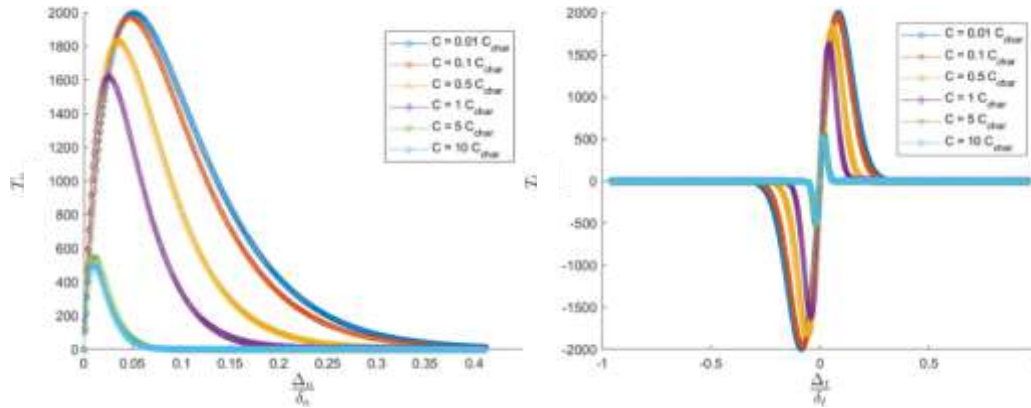
شکل ۳-۲- حالت‌های تغییر شکل نیافته و تغییر شکل یافته ناحیه چسبنده.

همان طور که در فصل قبل بیان شد و در روابط (۷-۳) و (۸-۳) دیده می‌شود، مدل المان چسبنده استفاده شده قابلیت استفاده در مواردی که جداشدگی عمودی و مماسی به صورت همزمان وجود دارند را دارا است. در شکل ۳-۳ کشش‌های ایجاد شده در راستای عمودی و مماسی تحت حضور همزمان جداشدگی‌های عمودی و مماسی را در این نوع مدل CZM نشان می‌دهد.



شکل ۳-۳- نمودارهای TSL مدل CZM ژو-نیدلمن.

در شکل ۳-۴ نیز اثرات افزایش غلظت یون‌های خورنده بر TSL المان‌های چسبنده طبق رابطه (۳-۴) تا (۳-۶) نشان داده شده است.



شکل ۳-۴- اثر افزایش C بر نمودارهای TSL در حالت‌های خالص عمودی و مماسی.

۳-۲-۱- آسیب المان‌های چسبنده و شرایط مرزی متحرک انتشار

آسیب یک المان چسبنده زمانی شروع می‌شود که کشش در TSL به حداکثر خود می‌رسد. از آنجایی که جداسدگی کلی در صفحه ترکیبی از جداسدگی عمودی و مماسی است، محاسبه کشش مؤثر، T_{eff} ، و کشش مؤثر بیشینه متناظر، T_{eff}^{max} ، مورد نیاز می‌باشد و یک پارامتر وابسته به تاریخچه برای آسیب، η_T ، تعریف می‌شود، رابطه (۳-۸). وضعیت لحظه‌ای یک المان چسبنده با پارامتر آسیب η_t با محدوده [0,1] تعریف می‌شود: $\eta_t = 0$ نشان‌دهنده ماده بدون آسیب و $\eta_t = 1$ نشان‌دهنده ماده کاملاً آسیب‌دیده است.

$$\eta_T = 1 - \frac{\sqrt{(T_n(\Delta_n, \Delta_t, c^{gb}))^2 + (T_t(\Delta_n, \Delta_t, c^{gb}))^2}}{\sqrt{(T_{nmax})^2 + (T_{tmax})^2}} \quad (3-10)$$

در رابطه (۳-۱۰) T_{nmax} و T_{tmax} بیانگر بیشترین کشش نرمال و مماسی تجربه شده می‌باشند. برای ارضای رفتار فیزیکی در هنگام باربرداری، لازم است برگشت‌ناپذیری آسیب بصورت رابطه (۳-۱۱) اعمال شود. در صورت بروز باربرداری، برگشت‌ناپذیری با اعمال یک الگوی باربرداری خطی به مبدا پس از تجمع آسیب، معرفی می‌شود.

$$\eta_T \geq \eta_T^{old} \quad (3-11)$$

در هر گام، پارامتر آسیب در جداشدگی‌های عمودی و مماسی فعلی، Δ_n و Δ_t ، محاسبه می‌شود و با بیشینه تاریخچه پارامتر آسیب مقایسه می‌شود. اگر رابطه (۱۱-۳) برقرار نباشد ابتدا کشش مؤثر متناظر با بیشینه تاریخچه پارامتر آسیب و متناظر با جهت‌های جداشدگی فعلی محاسبه می‌شود، T_{eff}^{aux} ، و پس از آن جداشدگی‌های عمودی و مماسی متناظر با این کشش مؤثر محاسبه می‌شوند، Δ_n^{aux} و Δ_t^{aux} . حال کشش‌های عمودی و مماسی در هنگام باربرداری به صورت رابطه (۱۲-۳) محاسبه می‌شوند:

$$T_n^{unloading} = \frac{\sqrt{\Delta_n^2 + \Delta_t^2}}{\sqrt{\Delta_n^{aux2} + \Delta_t^{aux2}}} \times T_n(\Delta_n^{aux}, \Delta_t^{aux}, c)$$

$$T_t^{unloading} = \frac{\sqrt{\Delta_n^2 + \Delta_t^2}}{\sqrt{\Delta_n^{aux2} + \Delta_t^{aux2}}} \times T_t(\Delta_n^{aux}, \Delta_t^{aux}, c) \quad (12-3)$$

بعد از ترک خوردگی (یا به عبارتی باز شدن) ناحیه چسبنده یا همان سطح مشترک، مقدار ضریب انتشار یابی، D ، از مقدار ضریب انتشار یابی در جامد، D_s ، به مقدار ضریب انتشار یابی در مایع، D_l ، تبدیل می‌شود که حدود 10^5 برابر ضریب انتشار یابی در جامد است. این امر منجر به شبیه‌سازی شرایط مرزی متحرک برای انتشار در پی پیش‌روی ترک می‌شود. با استفاده از پارامتر η_T می‌توان ضریب D را متغیری بر حسب این پارامتر تعریف کرد و تحول D از D_s به D_l را به صورت رابطه (۱۳-۳) تعریف کرد.

$$D(\eta_T) = (D_l - D_s)\eta_T^{n_0} + D_s \quad (13-3)$$

در این رابطه بالا مقدار پارامتر n_0 می‌تواند در بازه $[1, \infty]$ باشد که شکل تابع تغییرات ضریب انتشار را مشخص می‌کند. این شکل می‌تواند از تابع خطی تا تابع پله بسته به مقدار n_0 متغیر باشد.

۳-۳- تشکیل دستگاه معادلات به روش اجزا محدود

با معرفی δc و $\delta \mathbf{u}$ به عنوان توابع آزمایشی^۱ و با استفاده از اصل کار مجازی^۲ و همچنین قضیه گرین^۳، فرم ضعیف گالرکین^۴ معادلات پایداری جرم و تعادل از روابط (۱-۳) و (۲-۳)، به صورت زیر می‌تواند نوشته شود:

$$\delta W^{\text{chem}} = \int_{\Omega_s} \delta c \dot{c} dV + \int_{\partial\Omega_s} \delta c (\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}^{\text{gb}}) dA - \int_{\Omega_s} \nabla^{\text{gb}} \delta c \cdot \mathbf{j} dV = 0 \quad (۱۴-۳)$$

$$\begin{aligned} \delta W^{\text{mech}} = \int_{\Omega} \delta \epsilon : \sigma dV - \int_{\Gamma_c^+} \delta \mathbf{u}^+ \cdot \mathbf{t}^+ dA - \int_{\Gamma_c^-} \delta \mathbf{u}^- \cdot \mathbf{t}^- dA \\ - \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot (\sigma \cdot \mathbf{n}) dA = 0 \end{aligned} \quad (۱۵-۳)$$

در روابط بالا $\delta \mathbf{u}^+$ و $\delta \mathbf{u}^-$ به ترتیب بیانگر بردار جابجایی نقاط روی مرز بالایی سطح مشترک، Γ_c^+ ، و بردار جابجایی نقاط روی مرز پایینی سطح مشترک، Γ_c^- ، می‌باشند. همچنین $\mathbf{t}^+$ و $\mathbf{t}^-$ بیانگر بردار ترکشن اعمال شده بر روی نقاط آن‌ها می‌باشد. در این روابط شرایط مرزی طبیعی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}^* \quad \text{on } \partial\Omega. \quad \mathbf{j} \cdot \mathbf{n}^{\text{gb}} = j^* \quad \text{on } \partial\Omega_s \quad (۱۶-۳)$$

با اعمال رابطه (۱۶-۳)، روابط (۳-۱۴) و (۱۵-۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$\delta W^{\text{chem}} = \int_{\Omega_s} \delta c \dot{c} dV + \int_{\partial\Omega_s} \delta c j^* dA - \int_{\Omega_s} \nabla^{\text{gb}} \delta c \cdot \mathbf{j} dV = 0 \quad (۱۷-۳)$$

-
- 1 Test function
 - 2 Virtual work
 - 3 Green theorem
 - 4 Weak form Galerkin

$$\delta W^{\text{mech}} = \int_{\Omega} \delta \epsilon : \sigma dV - \int_{\Gamma_c^+} \delta \mathbf{u}^+ \cdot \mathbf{t}^+ dA - \int_{\Gamma_c^-} \delta \mathbf{u}^- \cdot \mathbf{t}^- dA - \int_{\partial \Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}^* dA = 0 \quad (۱۸-۳)$$

تانسور کرنش به صورت رابطه (۱۸-۳) تعریف می‌شود.

$$\epsilon = \frac{1}{2}(\mathbf{u} \otimes \nabla + \nabla \otimes \mathbf{u}) \Rightarrow \delta \epsilon = \frac{1}{2}(\delta \mathbf{u} \otimes \nabla + \nabla \otimes \delta \mathbf{u}) \quad (۱۹-۳)$$

با توجه به اینکه در ناحیه چسبنده باید تعادل نیرویی برقرار باشد، بردارهای $\mathbf{t}^+$ و $\mathbf{t}^-$ باید قدر مطلق برابر و جهت مخالف همدیگر داشته باشند، پس می‌توان نوشت:

$$\mathbf{t}^- = -\mathbf{t}^+ = \mathbf{t} \quad (۲۰-۳)$$

همچنین باید توجه داشت که در حالت اولیه و تغییر شکل نیافته ناحیه چسبنده، مرز بالایی سطح مشترک، Γ_c^+ ، و مرز پایینی سطح مشترک، Γ_c^- ، بر روی همدیگر قرار دارند و $\Gamma_c^+ = \Gamma_c^- = \Gamma_c$ می‌باشد. حال با توجه به این نکات می‌توان رابطه (۱۸-۳) را به صورت زیر نوشت.

$$\delta W^{\text{mech}} = \int_{\Omega} \delta \epsilon : \sigma dV + \int_{\Gamma_c} (\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}^-) \cdot \mathbf{t} dA - \int_{\partial \Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}^* dA = 0 \quad (۲۱-۳)$$

در روابط (۱۷-۳) و (۲۱-۳) کار مجازی داخلی و خارجی را می‌توان به صورت زیر تفکیک کرد:

$$\delta W_{\text{int}}^{\text{chem}} = \int_{\Omega_s} \delta c \dot{c} dV - \int_{\Omega_s} \nabla^{gb} \delta c \cdot \mathbf{j} dV, \delta W_{\text{ext}}^{\text{chem}} = - \int_{\partial \Omega_s} \delta c j^* dA \quad (۲۲-۳)$$

$$\delta W_{\text{int}}^{\text{mech}} = \int_{\Omega} \delta \epsilon : \sigma dV + \int_{\Gamma_c} (\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}^-) \cdot \mathbf{t} dA \quad (۲۳-۳)$$

$$\delta W_{\text{ext}}^{\text{mech}} = \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}^* dA \quad (24-3)$$

در رابطه (۲۳-۳)، $\delta W_{\text{int}}^{\text{mech}}$ را می‌توان به کار مجازی داخلی حجم توده، $\delta W_{\text{int}}^{\text{bulk}}$ ، و کار مجازی داخلی ناحیه چسبنده، $\delta W_{\text{int}}^{\text{cz}}$ ، به صورت روابط زیر تفکیک کرد.

$$\delta W_{\text{int}}^{\text{bulk}} = \int_{\Omega} \delta \epsilon : \sigma dV \quad (25-3)$$

$$\delta W_{\text{int}}^{\text{cz}} = \int_{\Gamma_c} (\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}^-) \cdot \mathbf{t} dA \quad (26-3)$$

۳-۳-۱- گسسته سازی معادله تعادل

با گسسته سازی میدان مکانیکی در دامنه مکانی، بردار جابجایی، $\mathbf{u}$ ، با استفاده از مقادیر جابجایی‌های گرهی المان‌ها، $\mathbf{u}^e$ ، و توابع شکل میدان مکانیکی، $\mathbf{N}^{\text{mech}}$ ، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{N}^{\text{mech}} \mathbf{u}^{eT} \Rightarrow \delta \mathbf{u} \approx \mathbf{N}^{\text{mech}} \delta \mathbf{u}^{eT} \quad (27-3)$$

حال می‌توان کار مجازی داخلی و خارجی را به صورت گسسته سازی شده نوشت و با مشتق‌گیری از جابجایی‌های مجازی گرهی، $\delta \mathbf{u}^e$ ، بردار نیروهای داخلی و خارجی را بدست آورد.

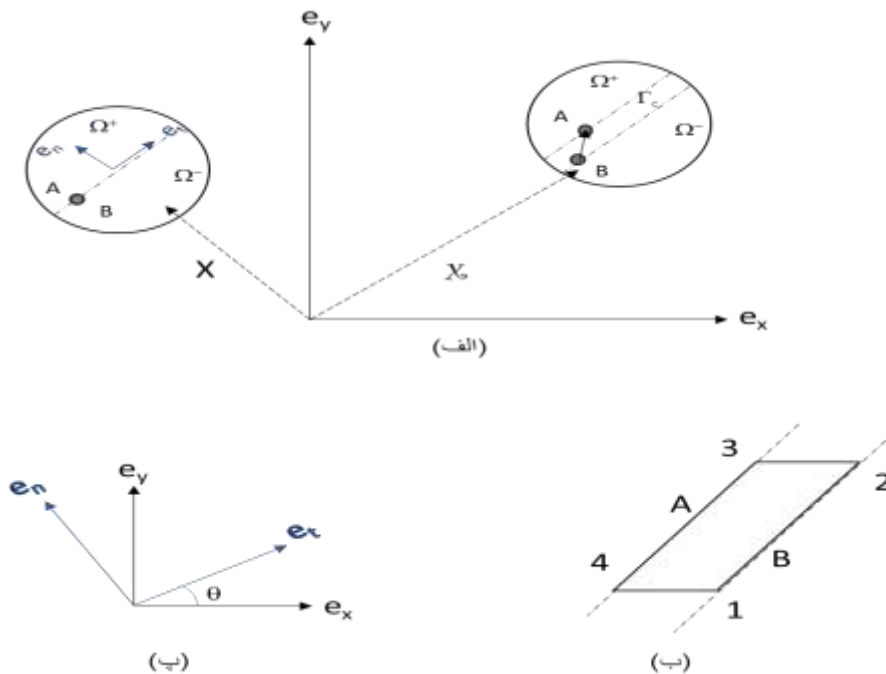
$$\delta W_{\text{int}}^{\text{bulk}^e} = \delta \mathbf{u}^{eT} \int_{\Omega^e} \frac{1}{2} (\mathbf{N}^{\text{mech}} \otimes \nabla + \nabla \otimes \mathbf{N}^{\text{mech}}) : \sigma dV \quad (28-3)$$

$$\Rightarrow \mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{bulk}^e} = \frac{\partial \delta W_{\text{int}}^{\text{bulk}^e}}{\partial \delta \mathbf{u}^e} = \int_{\Omega^e} \frac{1}{2} (\mathbf{N}^{\text{mech}} \otimes \nabla + \nabla \otimes \mathbf{N}^{\text{mech}}) : \sigma dV$$

$$\delta W_{\text{ext}}^{\text{mech}^e} = \int_{\partial\Omega^e} \delta \mathbf{u}^T \mathbf{t}^* dA = \delta \mathbf{u}^e \int_{\partial\Omega^e} \mathbf{N}^{\text{mech}^e T} \mathbf{t}^* dA$$

$$\Rightarrow \mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{mech}^e} = \frac{\partial \delta W_{\text{ext}}^{\text{mech}^e}}{\partial \delta \mathbf{u}^e} = \int_{\partial\Omega^e} \mathbf{N}^{\text{mech}^e T} \mathbf{t}^* dA \quad (۳-۲۹)$$

برای بدست آوردن بردار نیروی داخلی المان های ناحیه چسبنده ابتدا باید رابطه بین جابجایی های مرز بالایی و پایینی سطح مشترک را با جابجایی های گرهی پیدا کرد. همانطور که در پیش تر بیان شد، اگر دو نقطه مادی A و B که به ترتیب در روی مرز بالایی و پایینی قرار دارند را در نظر بگیریم که در حالت تغییر شکل نیافته از لحاظ مکانی بر روی یکدیگر قرار دارند، بعد از جابجایی از یکدیگر فاصله می گیرند، (شکل ۳-۵ الف)).



شکل ۳-۵- الف) حالت های تغییر شکل نیافته و تغییر شکل یافته محیط پیوسته دارای سطح مشترک چسبنده،
ب) المان چسبنده در هنگام جداشدگی و (پ) تبدیل محورها.

پس می توان برای اختلاف جابجایی مرز بالایی و پایینی نوشت:

$$\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- = \begin{bmatrix} u_x^A \\ u_y^A \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u_x^B \\ u_y^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_x^A - u_x^B \\ u_y^A - u_y^B \end{bmatrix} = \Delta \mathbf{u}^{AB} \quad (۳-۳۰)$$

$$\Delta \mathbf{u}^{AB} = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_x^{AB} \\ \Delta \mathbf{u}_y^{AB} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_x^A \\ u_y^A \\ u_x^B \\ u_y^B \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} u_x^A \\ u_y^A \\ u_x^B \\ u_y^B \end{bmatrix} \quad (3-31)$$

حال با توجه به المان چسبنده نشان داده شده در شکل ۳-۵ ب، جابجایی نقاط A و B در راستای محور های مختصات را می توان بر حسب جابجایی های گره های المان با استفاده از توابع شکل آن ها به صورت زیر نوشت.

$$\begin{bmatrix} u_x^A \\ u_y^A \\ u_x^B \\ u_y^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & N_3^{mech} & 0 & N_4^{mech} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_3^{mech} & 0 & N_4^{mech} \\ N_1^{mech} & 0 & N_2^{mech} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N_1^{mech} & 0 & N_2^{mech} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{x1} \\ u_{y1} \\ u_{x2} \\ u_{y2} \\ u_{x3} \\ u_{y3} \\ u_{x4} \\ u_{y4} \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{N}} \mathbf{u}^e \quad (3-32)$$

$$\Delta \mathbf{u}^{AB} = \mathbf{A} \hat{\mathbf{N}} \mathbf{u}^e \Rightarrow \Delta \delta \mathbf{u}^{AB} = \mathbf{A} \hat{\mathbf{N}} \delta \mathbf{u}^e \quad (3-33)$$

در رابطه (۳-۲۱) بردار ترکشن، $\mathbf{t}$ ، به صورت $\begin{bmatrix} t_x \\ t_y \end{bmatrix}$ می باشد که از مولفه های این بردار در راستاهای محورهای مختصات کلی تشکیل شده است. اما با استفاده از قانون TSL مولفه های بردار ترکشن در راستاهای مماسی، T_t ، و نرمال، T_n ، بدست می آید. به همین دلیل باید ارتباط بین مولفه های بردار ترکشن در راستاهای مماس و عمود بر راستای سطح مشترک را با مولفه های بردار ترکشن در راستاهای محورهای کلی بدست آید. یعنی به صورت کلی باید ارتباط بین راستاهای e_t و e_n با راستاهای e_x و e_y (شکل ۳-۵)، را بدست آورد:

$$e_t = [\cos \theta \quad \sin \theta] \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \end{bmatrix}; \quad e_n = [-\sin \theta \quad \cos \theta] \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \end{bmatrix} \quad (3-34)$$

$$\begin{bmatrix} e_t \\ e_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \end{bmatrix} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \end{bmatrix} \quad (35-3)$$

ماتریس $\mathbf{Q}$ ماتریسی متعامد است و معکوس این ماتریس برابر می‌شود با ترانپوز این ماتریس، پس می‌توان نوشت:

$$\begin{bmatrix} e_x \\ e_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_t \\ e_n \end{bmatrix} = \mathbf{Q}^T \begin{bmatrix} e_t \\ e_n \end{bmatrix} \quad (36-3)$$

و به صورت مشابه برای بردار ترکشن می‌توان نوشت:

$$\begin{bmatrix} t_x \\ t_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_t \\ T_n \end{bmatrix} = \mathbf{Q}^T \begin{bmatrix} T_t \\ T_n \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{t} = \mathbf{Q}^T \mathbf{T}^{cz} \quad (37-3)$$

در این رابطه بردار ترکشن در راستاهای مماسی و عمودی، $\mathbf{T}^{cz}$ ، را به اصطلاح بردار ترکشن صفحه میانی می‌نامند. با استفاده از روابط بدست آمده می‌توان کار مجازی داخلی ناحیه چسبنده را گسسته سازی کرد و بردار نیروهای داخلی المان‌های چسبنده را بدست آورد:

$$\begin{aligned} \delta W_{int}^{cz e} &= \int_{\Gamma_c^e} (\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}^-) \cdot \mathbf{t} dA = \int_{\Gamma_c^e} \Delta \delta \mathbf{u}^{ABT} \mathbf{Q}^T \mathbf{T}^{cz} dA \\ &= \int_{\Gamma_c^e} \delta \mathbf{u}^{eT} \hat{\mathbf{N}}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{T}^{cz} dA \end{aligned} \quad (38-3)$$

$$\mathbf{f}_{int}^{cz e} = \frac{\partial \delta W_{int}^{cz e}}{\partial \delta \mathbf{u}^e} = \int_{\Gamma_c^e} \hat{\mathbf{N}}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{T}^{cz} dA \quad (39-3)$$

با بدست آمدن بردار نیروهای داخلی المان چسبنده، ماتریس سختی المان را می‌توان با مشتق گیری نسبت به درجات آزادی گرهی بدست آورد:

$$\mathbf{K}^{cz e} = \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^{cz e}}{\partial \mathbf{u}^e} = \int_{\Gamma_c^e} \hat{\mathbf{N}}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Q}^T \frac{\partial \mathbf{T}^{cz}}{\partial \mathbf{u}^e} dA = \int_{\Gamma_c^e} \hat{\mathbf{N}}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Q}^T \frac{\partial \mathbf{T}^{cz}}{\partial \Delta} \frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{u}^e} dA \quad (40-3)$$

Δ بیانگر بردار جابجایی در راستاهای مماس بر سطح مشترک، Δ_t ، و عمود بر سطح مشترک، Δ_n ، می‌باشد. برای محاسبه مشتقات جزئی بردار Δ نسب به جابجایی‌های گرهی به صورت زیر می‌توان عمل کرد:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_t &= [\cos \theta \quad \sin \theta] \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_x^{AB} \\ \Delta \mathbf{u}_y^{AB} \end{bmatrix} \\ \Delta_n &= [-\sin \theta \quad \cos \theta] \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_x^{AB} \\ \Delta \mathbf{u}_y^{AB} \end{bmatrix} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Delta = \begin{bmatrix} \Delta_t \\ \Delta_n \end{bmatrix} = \mathbf{Q} \mathbf{A} \hat{\mathbf{N}} \mathbf{u}^e \Rightarrow \frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{u}^e} = \mathbf{Q} \mathbf{A} \hat{\mathbf{N}} \quad (41-3)$$

حال نیاز به محاسبه مشتقات جزئی بردار ترکشن صفحه میانی نسبت به بردار Δ می‌باشد:

$$\frac{\partial \mathbf{T}^{cz}}{\partial \Delta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_t}{\partial \Delta_t} & \frac{\partial T_t}{\partial \Delta_n} \\ \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} & \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \end{bmatrix} = \mathbf{S} \quad (42-3)$$

درایه‌های ماتریس بالا را می‌توان با استفاده از روابط (۷-۳) و (۸-۳) محاسبه کرد.

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_t}{\partial \Delta_t} &= \left[\left(1 - 2 \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) 2 \frac{\phi_n}{\delta_t^2} \left(1 + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \right] \\ &\times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{char}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (43-3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_t}{\partial \Delta_n} &= \left[2 \frac{\phi_n}{\delta_t} \frac{\Delta_t}{\delta_t} \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n^2} \right) \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \right] \\ &\times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{char}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (44-3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} &= \left[\frac{\phi_n}{\delta_n} \frac{\Delta_n}{\delta_n} \left(-2 \frac{\Delta_t}{\delta_t^2} \right) \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \right] \\ &\times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{char}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (45-3)$$

$$\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} = \left[\frac{\phi_n}{\delta_n^2} \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \right] \times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{\text{char}}} \right) \right) \right] \quad (46-3)$$

با استفاده از روابط (۳-۴۳) تا (۳-۴۶) ماتریس S را به صورت زیر می‌توان نوشت.

$$S = \begin{bmatrix} \left(1 - 2 \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \frac{1}{\delta_t^2} \left(1 + \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) & \frac{\Delta_t}{\delta_t^2} \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n^2} \right) \\ \frac{\Delta_n}{\delta_n^2} \left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t^2} \right) & \frac{1}{2\delta_n^2} \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \end{bmatrix} 2\phi_n \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{\text{char}}} \right) \right) \right] \quad (47)$$

با بدست آمدن مشتقات جزئی بردار Δ نسب به جابجایی‌های گرهی و مشتقات جزئی بردار ترکشن صفحه میانی نسبت به بردار Δ ، می‌توان ماتریس سختی المان چسبنده را بدست آورد. همچنین با توجه به فرض تنش صفحه‌ای^۱ یا کرنش صفحه‌ای^۲ جزء دیفرانسیلی سطح، dA ، را می‌توان برحسب ضرب پهنای درون صفحه، w ، در جزء دیفرانسیلی طول نوشت، dl .

$$K^{cz^e} = \int_{\Gamma_c^e} \hat{N}^T A^T Q^T S Q A \hat{N} dA = w \int_{l_{el}} \hat{N}^T A^T Q^T S Q A \hat{N} dl \quad (48-3)$$

با توجه به معلوم بودن ماتریس‌های $\hat{N}$ ، A و Q ضرب ماتریسی آن‌ها را می‌توان بدست آورد.

$$\hat{N}^T A^T Q^T = (Q A \hat{N})^T = \begin{bmatrix} -N_1^{\text{mech}} \cos \theta & N_1^{\text{mech}} \sin \theta \\ -N_1^{\text{mech}} \sin \theta & -N_1^{\text{mech}} \cos \theta \\ -N_2^{\text{mech}} \cos \theta & N_2^{\text{mech}} \sin \theta \\ -N_2^{\text{mech}} \sin \theta & -N_2^{\text{mech}} \cos \theta \\ N_3^{\text{mech}} \cos \theta & -N_3^{\text{mech}} \sin \theta \\ N_3^{\text{mech}} \sin \theta & N_3^{\text{mech}} \cos \theta \\ N_4^{\text{mech}} \cos \theta & -N_4^{\text{mech}} \sin \theta \\ N_4^{\text{mech}} \sin \theta & N_4^{\text{mech}} \cos \theta \end{bmatrix} \quad (49-3)$$

1 Plane stress

2 Plane strain

۳-۳-۲- گسسته سازی معادله پایداری جرم

بر خلاف معادله تعادل که تنها نیاز به گسسته سازی در دامنه مکانی دارد، معادله پایداری جرم به گسسته سازی هم در دامنه مکانی و هم در دامنه زمانی نیاز دارد. برای گسسته سازی میدان شیمیایی در دامنه زمانی از روش گام عقبگرد اوایلر^۱ استفاده می‌شود و رابطه (۲-۳) و متعاقباً رابطه (۳-۱۷) به صورت زیر در دامنه زمانی گسسته سازی می‌شوند.

$$c_{t+1} - c_t = -\Delta t \nabla^{gb} \cdot \mathbf{j}_{t+1} \quad (۵۰-۳)$$

$$\delta W^{\text{chem}} = \int_{\Omega_s} \delta c (c_{t+1} - c_t) dV + \Delta t \int_{\partial \Omega_s} \delta c j^* dA - \Delta t \int_{\Omega_s} \nabla^{gb} \delta c \cdot \mathbf{j}_{t+1} dV = 0 \quad (۵۱-۳)$$

در روابط بالا، اندیس $t+1$ بیانگر گام زمانی فعلی و اندیس t بیانگر گام زمانی قبلی است. برای گسسته سازی میدان شیمیایی در دامنه مکانی، غلظت یون‌های خورنده، c ، با استفاده از مقادیر گرهی غلظت در المان‌ها، c^e ، و توابع شکل میدان شیمیایی، N^{chem} ، نوشته می‌شود:

$$c \approx N^{\text{chem}} c^e \Rightarrow \delta c \approx N^{\text{chem}} \delta c^e \quad (۵۲-۳)$$

حال می‌توان کار مجازی را به صورت گسسته سازی شده نوشت و با مشتق گیری نسبت به غلظت‌های مجازی گرهی، δc^e ، بردار نیروهای داخلی و خارجی انتشار را بدست آورد. همچنین شار در گام زمانی فعلی، $\mathbf{j}_{t+1}$ ، را می‌توان با توجه به رابطه (۳-۹) به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{j}_{t+1} = -D \nabla^{gb} c_{t+1} + D c_{t+1} \frac{V_{O_2}}{RT} \nabla^{gb} T_n \quad (۵۳-۳)$$

$$\begin{aligned}
\delta W^{\text{chem}^e} &= \int_{\Omega_s} \delta c^T (c_{t+1} - c_t) dV + \Delta t \int_{\partial\Omega_s} \delta c^T j^* dA \\
&\quad - \Delta t \int_{\Omega_s} (\nabla^{gb} \delta c)^T j_{t+1} dV \\
&= \delta c^e \int_{\Omega_s} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} (c_{t+1} - c_t) dV + \Delta t \delta c^e \int_{\partial\Omega_s} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} j^* dA \\
&\quad - \Delta t \delta c^e \int_{\Omega_s} (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}})^T j_{t+1} dV = 0
\end{aligned} \tag{۵۴-۳}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}^{\text{diff}^e} &= \mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}^e} - \mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{diff}^e} = \frac{\partial \delta W^{\text{chem}^e}}{\partial \delta c^e} \\
&= \int_{\Omega_s} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} (\mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_{t+1}^e - \mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_t^e) dV \\
&\quad + \Delta t \int_{\partial\Omega_s} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} j^* dA \\
&\quad - \Delta t \int_{\Omega_s} (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}})^T \left(-D (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}}) \mathbf{c}_{t+1}^e \right. \\
&\quad \left. + D \mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_{t+1}^e \frac{V_{O_2}}{RT} \nabla^{gb} T_n \right) dV = 0
\end{aligned} \tag{۵۵-۳}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}^e} &= \int_{\Omega_s^e} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} \mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_{t+1}^e dV \\
&\quad + D \Delta t \int_{\Omega_s^e} (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}})^T (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}}) \mathbf{c}_{t+1}^e dV \\
&\quad - D \frac{V_{O_2}}{RT} \Delta t \int_{\Omega_s^e} (\nabla^{gb} \mathbf{N}^{\text{chem}})^T \mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_{t+1}^e \nabla^{gb} T_n dV
\end{aligned} \tag{۵۶-۳}$$

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{diff}^e} = \int_{\Omega_s^e} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} \mathbf{N}^{\text{chem}} \mathbf{c}_t^e dV - \Delta t \int_{\partial\Omega_s^e} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} j^* dA \tag{۵۷-۳}$$

با توجه به اینکه فرآیند انتشار فقط در راستای مرز بین دانه‌ای یا همان سطح مشترک اتفاق می‌افتد می‌توان گفت این فرآیند شبه یک بعدی است و برای محاسبه ∇^{gb} باید مشتق در راستای طول، $\frac{\partial}{\partial l}$ ، را حساب کرد. همچنین بجای جزء دیفرانسیلی حجم، dV ، می‌توان ضرب سطح مقطع در جزء دیفرانسیلی طول، Adl ، را جایگذاری کرد. سطح مقطع A از ضرب پهنای درون صفحه، w ، در ارتفاع در نظر گرفته شده برای محدوده Ω_s ، یعنی h محاسبه می‌شود. لازم به ذکر است که سطح مقطع در تمام دامنه Ω_s ثابت می‌باشد. با توجه به توضیحات بالا برای $\nabla^{gb} T_n$ می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned}\nabla^{gb} T_n &= \frac{\partial T_n}{\partial l} = \frac{\partial T_n}{\partial \Delta} \frac{\partial \Delta}{\partial l} = \left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \frac{\partial \left[\begin{smallmatrix} \Delta_t \\ \Delta_n \end{smallmatrix} \right]}{\partial l} = \left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \mathbf{QA} \frac{\partial \hat{\mathbf{N}}}{\partial l} \mathbf{u}^e \\ &= \left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \mathbf{QA} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{u}^e\end{aligned}\quad (58-3)$$

مشتقات جزئی ترکشن نرمال نسبت به جداولگی های مماسی و نرمال در روابط (۴۵-۳) و (۴۶-۳) محاسبه شده‌اند و رابطه (۵۸-۳) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_n}{\partial l} &= \left[2\phi_n \exp \left(-\frac{\Delta_n}{\delta_n} - \frac{\Delta_t^2}{\delta_t^2} \right) \right] \times \left[1 - d_{O_2, \max} \left(1 - \exp \left(-\frac{c}{c_{char}} \right) \right) \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\Delta_n}{\delta_n^2} \left(-\frac{\Delta_t}{\delta_t^2} \right) \quad \frac{1}{2\delta_n^2} \left(1 - \frac{\Delta_n}{\delta_n} \right) \right] \mathbf{QA} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{u}^e\end{aligned}\quad (59-3)$$

با توجه به توضیحات بالا و در نظر گرفتن المان دو گرهی، روابط (۵۶-۳) و (۵۷-۳) را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_{int}^{diff^e} &= A \left[\int_{l_{el}} \mathbf{N}^{chem^T} \mathbf{N}^{chem} dl + D \Delta t \int_{l_{el}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}^{chem}}{\partial l} \right)^T \left(\frac{\partial \mathbf{N}^{chem}}{\partial l} \right) dl \right. \\ &\quad \left. - D \frac{V_{O_2}}{RT} \Delta t \int_{l_{el}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}^{chem}}{\partial l} \right)^T \mathbf{N}^{chem} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \mathbf{QA} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{u}^e \right) dl \right] \mathbf{c}_{t+1}^{e^T}\end{aligned}\quad (60-3)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_{ext}^{diff^e} &= \left[A \int_{l_{el}} \mathbf{N}^{chem^T} \mathbf{N}^{chem} dl \right] \mathbf{c}_t^{e^T} \\ &\quad - \Delta t \left(\mathbf{N}^{chem^T} (l = l_1) \int_{A_1} j^* dA + \mathbf{N}^{chem^T} (l = l_2) \int_{A_2} j^* dA \right) \\ &= \left[A \int_{l_{el}} \mathbf{N}^{chem^T} \mathbf{N}^{chem} dl \right] \mathbf{c}_t^{e^T} - \Delta t \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} A (-j^{*1}) + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} A j^{*2} \right) \\ &= A \left[\left(\int_{l_{el}} \mathbf{N}^{chem^T} \mathbf{N}^{chem} dl \right) \mathbf{c}_t^{e^T} + \Delta t \begin{bmatrix} j^{*1} \\ -j^{*2} \end{bmatrix} \right]\end{aligned}\quad (61-3)$$

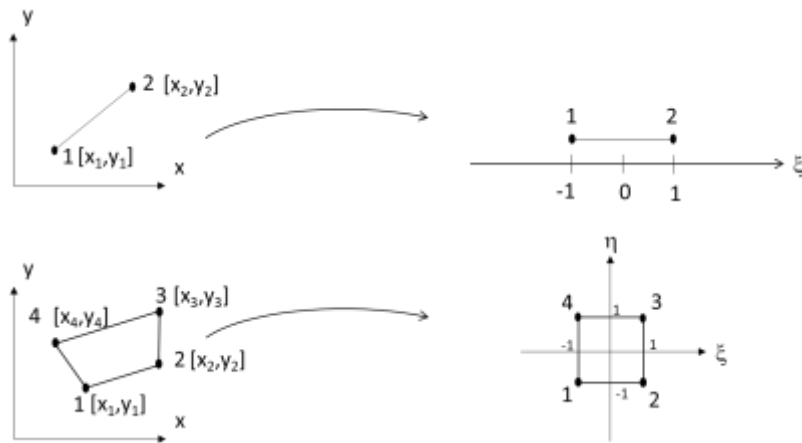
حال می‌توان از بردار نیروی داخلی انتشار در هر المان، $\mathbf{f}_{int}^{diff^e}$ ، نسبت به مقادیر گرهی غلظت مشتق گرفت و ماتریس سختی انتشار در هر المان را بدست آورد:

$$K^{\text{diff}^e} = \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}^e}}{\partial \mathbf{c}^e}$$

$$= A \left[\int_{l_{el}} \mathbf{N}^{\text{chem}^T} \mathbf{N}^{\text{chem}} dl + D \Delta t \int_{l_{el}} \mathbf{B}^{\text{chem}^T} \mathbf{B}^{\text{chem}} dl \right. \\ \left. - D \frac{V_{O_2}}{RT} \Delta t \int_{l_{el}} \mathbf{B}^{\text{chem}^T} \mathbf{N}^{\text{chem}} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta_t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \mathbf{QA} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{u}^e \right) dl \right] \quad (۶۲-۳)$$

۳-۳-۴- توابع شکل در مختصات طبیعی و انتگرال گیری عددی

با بدست آمدن ماتریس سختی و بردار نیروهای داخلی، حال نوبت به معرفی توابع شکل و محاسبه انتگرال‌های مورد نیاز می‌باشد. با تصویر کردن المان‌ها در مختصات طبیعی^۱ و معرفی توابع شکل در مختصات طبیعی می‌توان از انتگرال گیری در نقاط گوس بهره‌مند شد. نحوه تصویر کردن المان دو گرهی و المان چهار گرهی در مختصات طبیعی به صورت زیر می‌باشد، (شکل ۳-۶).



شکل ۳-۶- تصویر المان‌ها در مختصات طبیعی.

برای المان دو گرهی داریم:

$$\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} = [N_1(\xi) \quad N_2(\xi)] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{N}\mathbf{y} = [N_1(\xi) \quad N_2(\xi)] \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \quad (۶۳-۳)$$

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi); \quad N_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi)$$

¹ Isoparametric

برای المان چهار گرهی داریم:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} &= [N_1(\xi, \eta) \quad N_2(\xi, \eta) \quad N_3(\xi, \eta) \quad N_4(\xi, \eta)] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \\ \mathbf{y} = \mathbf{N}\mathbf{y} &= [N_1(\xi, \eta) \quad N_2(\xi, \eta) \quad N_3(\xi, \eta) \quad N_4(\xi, \eta)] \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (۶۴-۳)$$

$$N_1(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) ; N_2(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta)$$

$$N_3(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) ; N_4(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta)$$

با توجه به تعاریف بالا حال می‌توان توابع شکل مورد نیاز برای محاسبه ماتریس سختی و بردار نیروهای داخلی را بر حسب توابع شکل ایزوپارامتریک تعریف کرد:

$$\mathbf{N}^{\text{chem}} = [N_1(\xi) \quad N_2(\xi)] = \left[\frac{1}{2}(1 - \xi) \quad \frac{1}{2}(1 + \xi) \right] = \mathbf{N} \quad (۶۵-۳)$$

برای توابع شکل المان چسبنده باید به این نکته توجه داشت که ضلع بالایی المان چسبنده، ضلع پایین یک المان چهار گرهی است و در این ضلع $\eta = -1$ می‌باشد؛ همچنین ضلع پایینی المان چسبنده ضلع بالایی یک المان چهار گرهی است و در این ضلع $\eta = 1$ می‌باشد. در نتیجه برای المان چسبنده نشان داده شده در شکل ۳-۵ ب به صورت زیر می‌توان عمل کرد:

$$N_1^{\text{mech}} = N_4(\xi, 1) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + 1) = \frac{1}{2}(1 - \xi) = N_1(\xi)$$

$$N_2^{\text{mech}} = N_3(\xi, 1) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + 1) = \frac{1}{2}(1 + \xi) = N_2(\xi)$$

(۶۶-۳)

$$N_3^{\text{mech}} = N_2(\xi, -1) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - (-1)) = \frac{1}{2}(1 + \xi) = N_2(\xi)$$

$$N_4^{\text{mech}} = N_1(\xi, -1) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - (-1)) = \frac{1}{2}(1 - \xi) = N_1(\xi)$$

با توجه به مجموعه روابط (۶۶-۳) ماتریس $\hat{\mathbf{N}}$ را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$\hat{\mathbf{N}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & N_2(\xi) & 0 & N_1(\xi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_2(\xi) & 0 & N_1(\xi) \\ N_1(\xi) & 0 & N_2(\xi) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N_1(\xi) & 0 & N_2(\xi) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (۶۷-۳)$$

همچنین مشتقات توابع شکل در مختصات طبیعی به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$\frac{d\mathbf{N}}{d\xi} = \mathbf{N}_{,\xi} = \mathbf{B}_N = [N_{1,\xi}(\xi) \quad N_{2,\xi}(\xi)] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (۶۸-۳)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{N}}}{d\xi} = \hat{\mathbf{N}}_{,\xi} = \hat{\mathbf{B}}_N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & N_{2,\xi}(\xi) & 0 & N_{1,\xi}(\xi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & N_{2,\xi}(\xi) & 0 & N_{1,\xi}(\xi) \\ N_{1,\xi}(\xi) & 0 & N_{2,\xi}(\xi) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N_{1,\xi}(\xi) & 0 & N_{2,\xi}(\xi) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (۶۹-۳)$$

با توجه به اینکه در محاسبه ماتریس سختی، مشتقات توابع شکل نسبت به جزء دیفرانسیلی طول، dl گرفته شده‌اند و همچنین تمامی انتگرال‌ها نیز بر روی طول گرفته شده‌اند و در آن‌ها نیز عامل انتگرال ساز جزء دیفرانسیلی طول است، نیاز به محاسبه جزء دیفرانسیلی طول در مختصات طبیعی می‌باشد:

$$\begin{aligned} dl &= \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} = \sqrt{\left(\frac{dx}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\xi}\right)^2} d\xi = \sqrt{\left(\frac{d\mathbf{N}\mathbf{x}}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{d\mathbf{N}\mathbf{y}}{d\xi}\right)^2} d\xi \\ &= \sqrt{(\mathbf{B}_N\mathbf{x})^2 + (\mathbf{B}_N\mathbf{y})^2} d\xi \\ &= \sqrt{\left(-\frac{x_1}{2} + \frac{x_2}{2}\right)^2 + \left(-\frac{y_1}{2} + \frac{y_2}{2}\right)^2} d\xi \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} d\xi = \frac{l_{el}}{2} d\xi \end{aligned} \quad (۷۰-۳)$$

در نتیجه برای مشتقات توابع شکل نسبت به جزء دیفرانسیلی طول می‌توان نوشت:

$$\frac{d}{dl}(\mathbf{N}^{chem}) = \frac{2}{l_{el}} \frac{d}{d\xi}(\mathbf{N}^{chem}) = \frac{2}{l_{el}} \frac{d\mathbf{N}}{d\xi} = \frac{2}{l_{el}} \mathbf{B}_N \quad (۷۱-۳)$$

$$\frac{d}{dl}(\hat{\mathbf{N}}) = \frac{2}{l_{el}} \frac{d\hat{\mathbf{N}}}{d\xi} = \frac{2}{l_{el}} \hat{\mathbf{B}}_N$$

با توجه به روابط بالا می‌توان ماتریس سختی و بردار نیروهای داخلی و خارجی را در مختصات طبیعی محاسبه کرد. بررسی جزئیات ابعادی هر کدام از ترم‌های ماتریس سختی، بردار نیروهای داخلی و بردار درجات آزادی گرهی نیز در زیر بیان شده است:

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{cz e}}_{8 \times 1} = w \int_{-1}^1 \hat{\mathbf{N}}^T_{8 \times 4} \mathbf{A}^T_{4 \times 2} \mathbf{Q}^T_{2 \times 2} \mathbf{T}^{\text{cz}}_{2 \times 1} \frac{l_{\text{el}}}{2} d\xi \quad (72-3)$$

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff e}}_{2 \times 1} = \quad (73-3)$$

$$\begin{aligned} & A \left[\int_{-1}^1 \mathbf{N}^T_{2 \times 1} \mathbf{N}_{1 \times 2} \frac{l_{\text{el}}}{2} d\xi + D \Delta t \int_{-1}^1 \frac{2}{l_{\text{el}}} \mathbf{B}_N^T_{2 \times 1} \mathbf{B}_{N1 \times 2} d\xi \right. \\ & \left. - D \frac{V_{\text{O}_2}}{RT} \Delta t \int_{-1}^1 \mathbf{B}_N^T_{2 \times 1} \mathbf{N}_{1 \times 2} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta n} \right]_{1 \times 2} \mathbf{Q}_{2 \times 2} \mathbf{A}_{2 \times 4} \frac{2}{l_{\text{el}}} \hat{\mathbf{B}}_{N4 \times 8} \mathbf{u}^e_{8 \times 1} \right) d\xi \right] \\ & \times [\mathbf{c}_{t+1}^e]_{2 \times 1}^T \end{aligned}$$

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{diff e}}_{2 \times 1} = A \left[\left(\int_{-1}^1 \mathbf{N}^T_{2 \times 1} \mathbf{N}_{1 \times 2} \frac{l_{\text{el}}}{2} d\xi \right) \mathbf{c}_t^e_{2 \times 1} + \Delta t \begin{bmatrix} j^{*1} \\ -j^{*2} \end{bmatrix} \right] \quad (74-3)$$

$$\mathbf{K}^{\text{cze}}_{8 \times 8} = w \int_{-1}^1 \hat{\mathbf{N}}^T_{8 \times 4} \mathbf{A}^T_{4 \times 2} \mathbf{Q}^T_{2 \times 2} \mathbf{S}_{2 \times 2} \mathbf{Q}_{2 \times 2} \mathbf{A}_{2 \times 4} \hat{\mathbf{N}}_{4 \times 8} \frac{l_{\text{el}}}{2} d\xi \quad (75-3)$$

$$\mathbf{K}^{\text{diff e}}_{2 \times 2} = \quad (76-3)$$

$$A \left[\int_{-1}^1 \mathbf{N}_{2 \times 1}^T \mathbf{N}_{1 \times 2} \frac{l_{el}}{2} d\xi + D \Delta t \int_{-1}^1 \frac{2}{l_{el}} \mathbf{B}_N^T \mathbf{B}_{N_{1 \times 2}} d\xi \right. \\ \left. - D \frac{V_{O_2}}{RT} \Delta t \int_{-1}^1 \mathbf{B}_N^T \mathbf{N}_{1 \times 2} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right]_{1 \times 2} \mathbf{Q}_{2 \times 2} \mathbf{A}_{2 \times 4} \frac{2}{l_{el}} \hat{\mathbf{B}}_{N_{4 \times 8}} \mathbf{u}_{8 \times 1}^e \right) d\xi \right]$$

۳-۴- روش حل گام زمانی

در بخش قبل جزئیات گسسته سازی معادلات حاکم در دامنه مکانی به تفصیل شرح داده شد و همچنین طرح اجرای گام زمانی استفاده شده معرفی شد و با استفاده از آن بردار نیروهای داخلی و خارجی میدان شیمیایی استخراج شدند. در این بخش، جزئیات اجرای گام زمانی در میدان‌های شیمیایی و مکانیکی و تعامل آن با الگوریتم حل معادلات غیرخطی به تفصیل شرح داده خواهد شد.

با توجه به رابطه (۳-۵۰) معادله حاکم بر میدان انتشار یا همان پایدگی جرم، با استفاده از روش گام عقبگرد اوپلر در زمان گسسته سازی می‌شود. حال با توجه به اینکه پاسخ میدان مکانیکی نیز در هر گام زمانی به‌روز می‌شود شار در گام زمانی فعلی را به صورت رابطه زیر می‌توان نوشت:

$$\mathbf{j}_{t+1} = -D \nabla^{gb} c_{t+1} + D c_{t+1} \frac{V_{O_2}}{RT} (\nabla^{gb} T_n)_{t+1} \quad (۷۷-۳)$$

با جایگذاری رابطه (۷۷-۳) در رابطه (۳-۵۰) و استفاده از روش اجزا محدود برای گسسته سازی در دامنه مکانی، روابط زیر برای نیروی داخلی انتشار و نیروی خارجی انتشار المان‌ها در هر گام زمانی بدست می‌آید:

$$\mathbf{f}_{int \ t+1}^{diff^e} = A \left[\int_{l_{el}} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dl + D \Delta t \int_{l_{el}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial l} \right)^T \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial l} \right) dl \right. \\ \left. - D \frac{V_{O_2}}{RT} \Delta t \int_{l_{el}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial l} \right)^T \mathbf{N} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta_n} \right] \mathbf{Q} \mathbf{A} \hat{\mathbf{B}} \mathbf{u}_{t+1}^e \right) dl \right] \mathbf{c}_{t+1}^{eT} \quad (۷۸-۳)$$

$$\mathbf{f}_{ext \ t+1}^{diff^e} = A \left[\left(\int_{l_{el}} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dl \right) \mathbf{c}_{t+1}^{eT} + \Delta t \begin{bmatrix} j_{*1}^1 \\ -j_{*2}^2 \end{bmatrix} \right] \quad (۷۹-۳)$$

در هر گام زمانی باید تعادل بین بردار نیروهای داخلی انتشار و نیروهای خارجی انتشار، $\mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}}_{t+1} = \mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{diff}}_{t+1}$ برقرار شود؛ همانطور که در رابطه (۷۸-۳) مشاهده می‌شود، بردار نیروی داخلی انتشار المان وابسته به درجات آزادی گرهی جابجایی در همان گام زمانی، $\mathbf{u}^e_{t+1}$ می‌باشد که با توجه به وابستگی پارامترهای مقاومت میدان مکانیکی به درجات آزادی گرهی غلظت، رابطه (۷-۳) و (۸-۳)، پاسخ میدان مکانیکی وابسته به درجات آزادی گرهی غلظت می‌باشد. طبق این تعاریف ماتریس سختی انتشار به صورت رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^{\text{diff}^e}_{t+1} &= \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}^e}_{t+1}}{\partial \mathbf{c}^e_{t+1}} \\ &= A \left[\int_{l_{\text{el}}} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dl + D \Delta t \int_{l_{\text{el}}} \mathbf{B}^T \mathbf{B} dl \right. \\ &\quad \left. - D \frac{V_{\text{O}_2}}{RT} \Delta t \int_{l_{\text{el}}} \mathbf{B}^T \mathbf{N} \left(\left[\frac{\partial T_n}{\partial \Delta t} \quad \frac{\partial T_n}{\partial \Delta n} \right] \mathbf{Q} \mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{u}^e_{t+1} \right) dl \right] \end{aligned} \quad (۸۰-۳)$$

با توجه به روابط بالا می‌توان نتیجه گرفت که رابطه بردار نیروی داخلی انتشار و ماتریس سختی انتشار، با درجات آزادی گرهی غلظت، به صورت غیر خطی می‌باشد؛ از این رو می‌توان نتیجه گرفت که برای بدست آوردن مقادیر درجات آزادی گرهی غلظت در هر گام زمانی، نیازمند روشی مانند تکرار نیوتون-رافسون برای حل دستگاه معادلات غیر خطی بدست آمده می‌باشد.

طبق روش نیوتون-رافسون، در هر گام زمانی، در هر تکرار با استفاده از مقادیر درجات آزادی گرهی، $\mathbf{u}^i_{t+1}$ و $\mathbf{c}^i_{t+1}$ بردار نیروهای داخلی کلی و ماتریس سختی کلی انتشار محاسبه می‌شوند و سپس باقی‌مانده تفریق بردار نیروهای خارجی از بردار نیروهای داخلی محاسبه می‌شود:

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{\text{diff}^i}_{t+1} - \mathbf{f}_{\text{ext}}^{\text{diff}^i}_{t+1} = \mathbf{R}^{\text{diff}^i}_{t+1} \quad (۸۱-۳)$$

در تکرار اول ($i=1$) حدس اولیه‌ای برای درجات آزادی گرهی نیاز می‌باشد، که مقادیر این حدس اولیه برابر با پاسخ درجات آزادی گرهی گام زمانی قبلی فرض می‌شود، $\mathbf{u}^{i=1}_{t+1} = \mathbf{u}_t$ و $\mathbf{c}^{i=1}_{t+1} = \mathbf{c}_t$.

در هر تکرار پس از بدست آمدن بردار باقی‌مانده فرآیند انتشار طبق رابطه (۸۲-۳) با تقسیم این بردار بر ماتریس سختی کلی انتشار، $\mathbf{K}^{\text{diff}^i}_{t+1}$ مقدار تغییرات مورد نیاز درجات آزادی گرهی غلظت برای تکرار بعدی محاسبه می‌شود.

$$\delta c_{t+1}^i = \frac{R_{t+1}^{diff}{}^i}{K_{t+1}^{diff}{}^i} \quad (۸۲-۳)$$

با بدست آمدن تغییرات مورد نیاز درجات آزادی گرهی غلظت، مقادیر این درجات آزادی گرهی طبق رابطه زیر برای تکرار بعدی محاسبه می‌شوند و تکرار نیوتون-رافسون بعدی شروع می‌شود:

$$c_{t+1}^{i+1} = c_{t+1}^i + \delta c_{t+1}^i \quad (۸۳-۳)$$

$$c_{t+1}^{i+1} \xrightarrow{i=i+1} c_{t+1}^i$$

حال با توجه مقادیر درجات آزادی گرهی غلظت در شروع تکرار و وابستگی پاسخ میدان جابجایی به مقادیر گرهی غلظت طبق رابطه، طبق روابط (۸۴-۳) نیازمند برقراری تعادل بین بردار نیروهای داخلی مکانیکی و نیروهای خارجی مکانیکی، $f_{int}^{mech}{}^i = f_{ext}^{mech}{}^i$ در تکرار فعلی می‌باشد.

$$f_{int}^{cze}{}^i = w \int_{l_{el}} \hat{N}^T A^T Q^T (T_{t+1}^{cz}{}^i) dl$$

$$f_{int}^{bulk}{}^i = \int_{\Omega^e} \frac{1}{2} (N^{mech} \otimes \nabla + \nabla \otimes N^{mech}) : \sigma_{t+1}^i dV \quad (۸۴-۳)$$

$$f_{ext}^{mech}{}^i = \int_{\partial\Omega^e} N^{mech}{}^T t^* dA$$

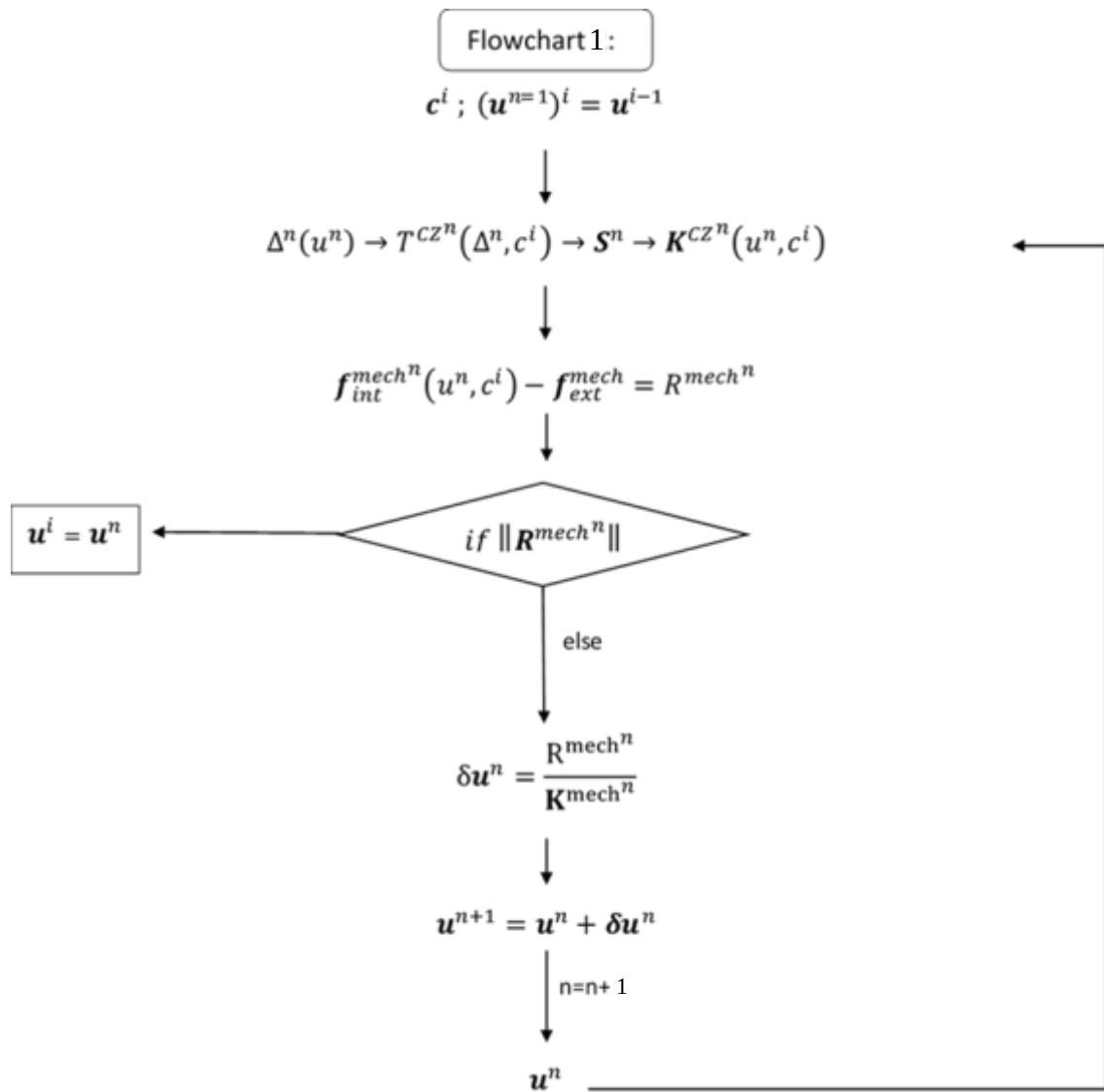
با توجه به رابطه بالا ارتباط بین بردار نیروهای داخلی مکانیکی و ماتریس سختی مکانیکی با درجات آزادی گرهی جابجایی طبق رابطه زیر به صورت غیر خطی می‌باشد:

$$K_{t+1}^{cze}{}^i = \frac{\partial f_{int}^{cze}{}^i}{\partial u_{t+1}^e} = w \int_{l_{el}} \hat{N}^T A^T Q^T S_{t+1}^i Q A \hat{N} dl \quad (۸۵-۳)$$

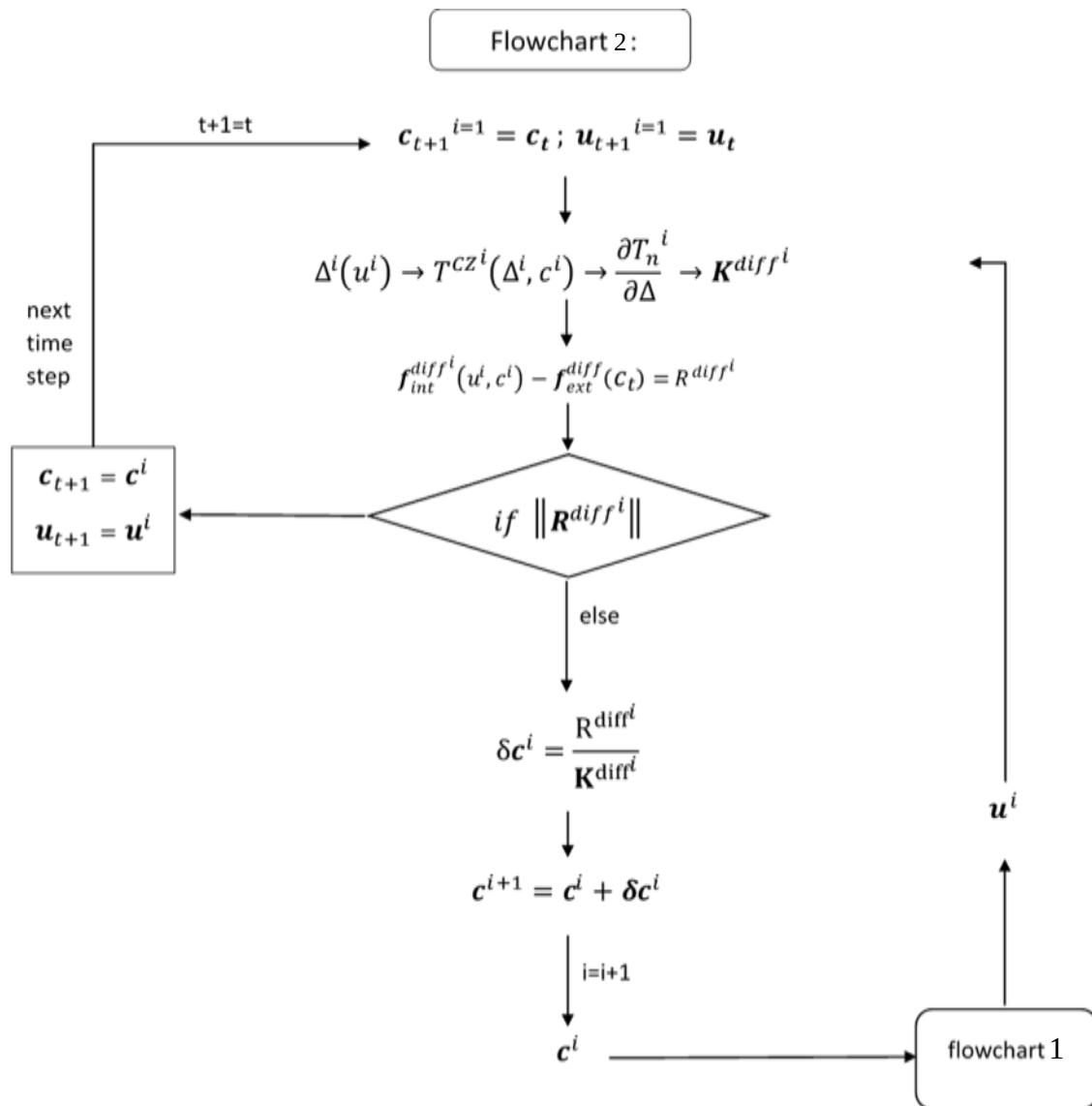
با توجه به روابط بالا برای بدست آوردن مقادیر درجات آزادی گرهی جابجایی که منجر به برقرار تعادل مکانیکی در تکرار فعلی می‌شوند، نیازمند بکار گیری جداگانه تکرار نیوتون-رافسون برای حل دستگاه معادلات مکانیکی غیر خطی بدست آمده می‌باشد که این فرآیند در شکل (۷-۳) نشان داده شده است. در فلوچارت (۱) شماره تکرار نیوتون-رافسون برای حل این دستگاه معادلات به صورت بالانویس n در پارامترهای متغیر نشان داده شده است، $(u^n)^i$ ، و همچنین حدس اولیه برای شروع این تکرارها برابر با پاسخ میدان جابجایی تکرار قبلی مربوط به معادلات انتشار فرض می‌شود، $(u^{n=1})^i = u^{i-1}$.

پس از برقراری تعادل مکانیکی و بدست آمدن مقادیر گرهی جابجایی مربوطه برای تکرار فعلی، $\mathbf{u}_{t+1}^i$ ، همانطور که پیش تر شرح داده شد، با استفاده از مقادیر درجات آزادی گرهی غلظت و جابجایی در گام فعلی، بردار نیروی داخلی انتشار و ماتریس سختی انتشار در گام فعلی محاسبه می‌شود و فرآیند شرح داده شده برای هر تکرار نیوتون-رافسون طی می‌شود و تا زمان صفر شدن قدر مطلق بردار باقی‌مانده انتشار، $R_{t+1}^{diff\ i}$ ، ادامه می‌یابد.

در تکراری که قدر مطلق بردار باقی‌مانده انتشار صفر می‌شود، مقادیر درجات آزادی گرهی غلظت و جابجایی در این تکرار به عنوان پاسخ مدل استخراج شده و در زمان به اندازه Δt پیش رفته و به گام زمانی بعدی رفته و این فرآیند برای یافتن پاسخ در گام زمانی جدید تکرار می‌شود. فرآیند شرح داده شده در شکل (۳-۸) نشان داده شده است.



شکل ۳-۷- الگوریتم حل غیرخطی میدان جابجایی در هر تکرار حل میدان غلظت.



شکل ۳-۸- فلوچارت الگوریتم حل غیرخطی گام زمانی برای میدان غلظت.

فصل ۴: نتایج مدل سازی و بحث

۴-۱- مقدمه

این فصل به ارائه، تحلیل و بحث نتایج عددی به دست آمده از مدل شیمیایی-مکانیکی گذرا و کاملاً همبسته می پردازد که چارچوب نظری و عددی آن در فصل ۳ به تفصیل شرح داده شد. همانطور که در فصول ۱ و ۲ بیان گردید، ترک خوردگی تنش-خوردگی بین دانه ای (IGSCC) یک پدیده پیچیده و چندوجهی است که از برهمکنش هم افزای تنش مکانیکی و تخریب شیمیایی در ریزساختار ماده نشأت می گیرد. هدف اصلی این فصل، ارائه شواهد محاسباتی برای تأیید این فرضیه است که یک رویکرد کاملاً همبسته و گذرا، برای شبیه سازی دقیق دینامیک این پدیده ضروری است.

روند ارائه مطالب در این فصل به صورت یک توالی ساختاریافته طراحی شده است تا اعتبار و قابلیت های مدل توسعه یافته را به طور کامل به اثبات برساند. این فرآیند با صحت سنجی مدل آغاز می شود، که در آن صحت پیاده سازی عددی رفتار مکانیکی و شیمیایی به صورت مجزا و با مقایسه با مسائل و حل های تحلیلی بررسی می گردد. این مرحله، سنگ بنای اعتماد به نتایج شبیه سازی های پیچیده تر بعدی را تشکیل می دهد و از عدم حضور خطاهای عددی اطمینان حاصل می کند.

در ادامه، فرآیند کالیبراسیون پارامترهای مدل برای چهار ترکیب ماده-محیط کلیدی در صنایع ارائه می‌شود: آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ و فولاد ضد زنگ در شرایط محیطی راکتورهای آب جوشان (BWR) و آب تحت فشار (PWR). در این بخش، پارامترهای فیزیکی مدل که اندازه‌گیری مستقیم آن‌ها دشوار است، به گونه‌ای تنظیم می‌شوند که نرخ رشد ترک (CGR) پیش‌بینی شده توسط شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی معتبر موجود در مراجع تطابق یابد.

پس از کالیبراسیون، قابلیت پیش‌بینی‌کنندگی مدل از طریق فرآیند اعتبارسنجی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. در این مرحله، پارامترهای کالیبره شده برای پیش‌بینی نرخ رشد ترک تحت شرایط بارگذاری مکانیکی و شیمیایی متفاوت از شرایط کالیبراسیون به کار گرفته می‌شود و نتایج آن با داده‌های آزمایشگاهی مستقل مقایسه می‌گردد. موفقیت در این مرحله، نشان‌دهنده توانایی مدل در فراتر رفتن از یک ابزار توصیفی و تبدیل شدن به یک ابزار پیش‌بینی‌کننده قابل اتکا است. در نهایت، فصل با بحث در مورد یافته‌ها به پایان می‌رسد که در آن تفسیر فیزیکی پارامترهای کالیبره شده، اهمیت مکانیزم‌های همبستگی و پیامدهای مهندسی نتایج مورد تحلیل و بررسی عمیق قرار می‌گیرند.

۴-۲- صحت سنجی مدل

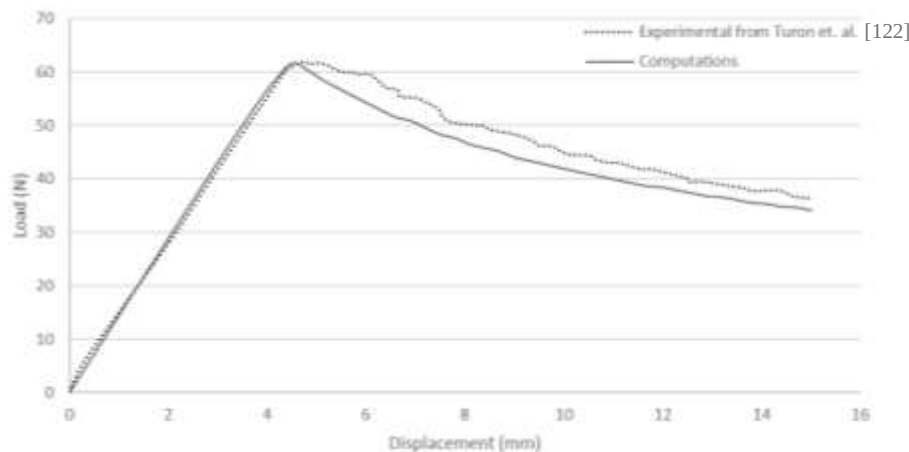
پیش از به‌کارگیری مدل برای شبیه‌سازی پدیده پیچیده IGSCC، ضروری است که صحت پیاده‌سازی عددی اجزای بنیادین آن به دقت ارزیابی شود. این فرآیند که به عنوان صحت‌سنجی شناخته می‌شود، با هدف ایجاد اطمینان از عملکرد صحیح کدهای محاسباتی در حل معادلات حاکم بر هر یک از میدان‌های فیزیکی (مکانیک و انتشار) به صورت مجزا انجام می‌پذیرد. این رویکرد ساختاریافته، یک اصل اساسی در توسعه مدل‌های محاسباتی قابل اعتماد است. در بخش‌های آتی، نتایج صحت‌سنجی برای مولفه‌های مکانیکی و انتشار به تفصیل ارائه می‌گردد.

۴-۲-۱- صحت سنجی رفتار مکانیکی

به منظور ارزیابی صحت عملکرد رفتار مکانیکی مدل، به ویژه پیاده‌سازی المان‌های چسبنده، یک شبیه‌سازی شکست خالص مکانیکی با استفاده از هندسه استاندارد تیر گیردار دوگانه (DCB) انجام شد. این آزمایش به طور گسترده به عنوان یک محک استاندارد برای مدل‌های ناحیه چسبنده (CZM) استفاده می‌شود، زیرا به طور مؤثری رفتار شکست در حالت بازشدگی خالص (Mode I) را شبیه‌سازی می‌کند. در این شبیه‌سازی، هیچ‌گونه اثر شیمیایی در نظر گرفته نشده و هدف صرفاً بررسی این موضوع

است که آیا قانون کشش-جدایش (TSL) پیاده‌سازی شده، همانطور که در فصل ۳ فرمول‌بندی شد، قادر به بازتولید صحیح فرآیند شکست و پیش‌روی ترک می‌باشد یا خیر.

برای این منظور، با استفاده از نتایج آزمایشگاهی موجود در پژوهش تورون و همکاران^۱ [۱۲۲] برای صحت سنجی، پارامترهای مشخصه ناحیه چسبنده شامل انرژی شکست، Φ_n ، برابر با 0.4 N/mm و حداکثر کشش قابل تحمل، T_{max} ، برابر با 30 MPa در نظر گرفته شد. نتایج شبیه‌سازی، که به صورت منحنی بار-جابجایی ارائه می‌شود، با رفتار مورد انتظار برای یک مدل CZM استاندارد تحت چنین شرایطی مطابقت دارد، شکل ۴-۱. این تطابق نشان می‌دهد که پیاده‌سازی المان‌های چسبنده و الگوریتم حل غیرخطی مکانیکی به درستی عمل کرده و قادر به ثبت دقیق فرآیند تدریجی کاهش سختی و جدایش سطوح ترک، مطابق با قانون TSL تعریف‌شده، می‌باشد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که مولفه مکانیکی مدل، پایه‌ای صحیح و قابل اتکا برای تحلیل‌های همبسته بعدی فراهم می‌آورد.



شکل ۴-۱- منحنی‌های نیرو-جابجایی بدست آمده آزمایشگاهی و محاسباتی آزمایش DCB.

۴-۲-۲- صحت سنجی رفتار انتشار

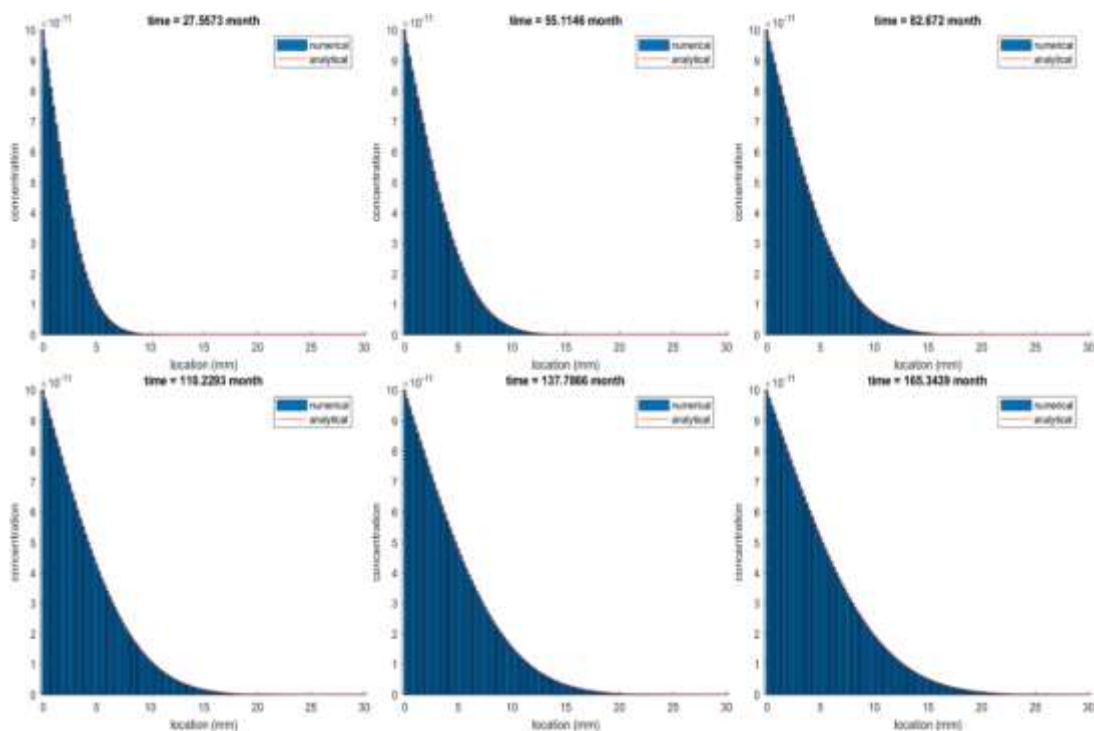
برای صحت‌سنجی رفتار شیمیایی مدل، یعنی محاسبه گر معادله انتشار گذرا، یک مسئله انتشار یک‌بعدی در یک دامنه محدود با شرایط مرزی مشخص شبیه‌سازی شد. مزیت این رویکرد آن است که برای چنین مسئله‌ای، یک حل تحلیلی دقیق وجود دارد، رابطه (۴-۱)، که می‌تواند به عنوان معیاری مطلق برای ارزیابی دقت نتایج عددی به کار رود. این صحت سنجی، توانایی مدل در حل صحیح قانون دوم فیک و پایداری و همگرایی طرح انتگرال‌گیری زمانی گام عقب‌گرد اوایلر را مورد سنجش قرار می‌دهد.

1 Turon et. al.

$$c(x, t) = c_s \left(1 - \frac{x}{L}\right) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2c_s}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{n^2\pi^2 Dt}{L^2}\right) \quad (۴-۱)$$

در رابطه بالا c_s مقدار شرایط مرزی غلظت ثابت در ابتدای دامنه، D ضریب انتشاریابی و L طول دامنه می‌باشد، همچنین رابطه بالا دارای شرایط مرزی غلظت صفر در انتهای دامنه می‌باشد.

در این شبیه‌سازی، ضریب انتشاریابی برابر با $10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$ و غلظت محیطی در مرز دامنه برابر با 10^{-10} در نظر گرفته شد. سپس، پروفیل غلظت در طول دامنه در زمان‌های مختلف محاسبه و با نتایج حاصل از حل تحلیلی مقایسه گردید، شکل ۴-۲. نتایج این مقایسه، تطابق بسیار بالایی بین پروفیل غلظت پیش‌بینی‌شده توسط مدل المان محدود و حل تحلیلی دقیق را نشان داد. این توافق مؤید آن است که پیاده‌سازی عددی معادله پایستگی جرم، شامل گسسته‌سازی مکانی با توابع شکل و گسسته‌سازی زمانی، به درستی انجام شده و محاسبه‌گر انتشار قادر است تکامل زمانی و مکانی میدان غلظت را با دقت بالایی شبیه‌سازی کند. این تأیید، اطمینان لازم برای استفاده از این حلگر در چارچوب مدل همبسته، که در آن فرآیند انتشار تحت تأثیر تنش قرار می‌گیرد، را فراهم می‌سازد.



شکل ۴-۲- مقایسه نتایج محاسبات با راه‌حل تحلیلی برای یک دامنه محدود یک بعدی با مقادیر مرزی مشخص در زمان‌های مختلف.

۳-۴- کالیبره کردن پارامترهای مدل

پس از تأیید صحت عملکرد اجزای مدل به صورت مجزا، گام بعدی کالیبراسیون پارامترهای فیزیکی حاکم بر برهمکنش شیمیایی-مکانیکی است. هدف از این فرآیند، تعیین مقادیر پارامترهایی است که به طور مستقیم از آزمایش‌های استاندارد قابل اندازه‌گیری نیستند، اما رفتار فیزیکی سیستم را کنترل می‌کنند. این پارامترها شامل ضریب انتشار در جامد، D_s ، غلظت مشخصه، C_{char} ، و پارامترهای تخریب، d_{o2} و d_{o8} می‌باشند. فرآیند کالیبراسیون با تنظیم این پارامترها به گونه‌ای انجام می‌شود که نرخ رشد ترک (CGR) پیش‌بینی‌شده توسط شبیه‌سازی با مقادیر CGR گزارش‌شده در داده‌های آزمایشگاهی معتبر برای ترکیب‌های ماده-محیط مشخص، و با شرایط محیطی و بارگذاری مکانیکی مشخص تطابق یابد.

در این تحقیق، کالیبراسیون با استفاده از هندسه و ابعاد نمونه استفاده شده در آزمایش‌ها، یعنی نمونه استاندارد فشرده کششی^۱ (CT) [۱۲۳]، انجام شده است، شکل ۴-۳. در این نمونه استاندارد ضریب شدت تنش، k ، به صورت روابط زیر تعریف می‌شود:

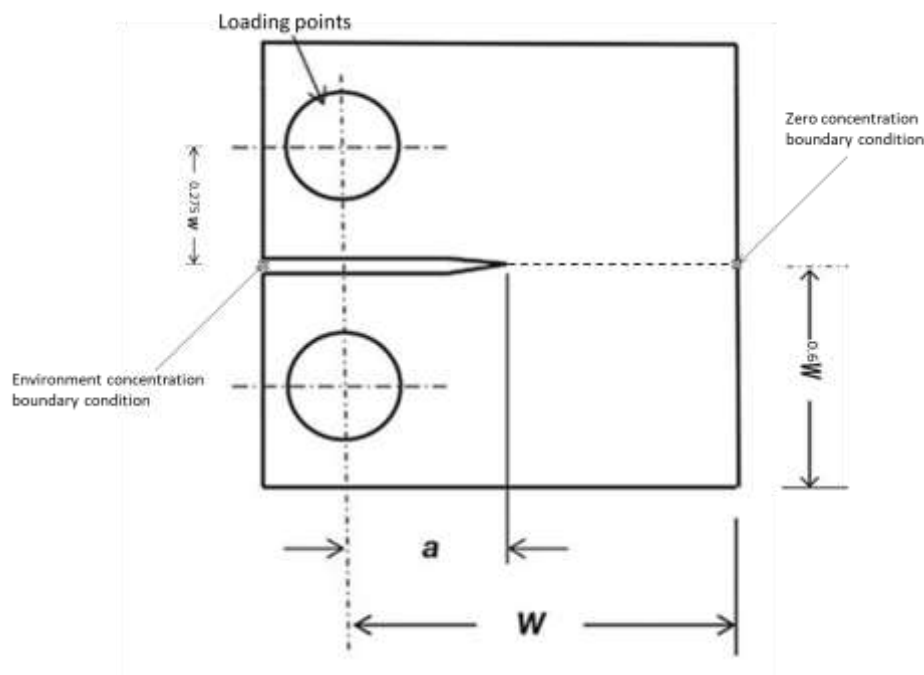
$$k = \frac{F \times f\left(\frac{a}{w}\right)}{B \times \sqrt{w}} \quad (۲-۴)$$

$$f\left(\frac{a}{w}\right) = \frac{\left(2 + \frac{a}{w}\right)}{\left(1 - \frac{a}{w}\right)^{\frac{3}{2}}} \times \left(0.886 + 4.64 \frac{a}{w} - 13.32 \left(\frac{a}{w}\right)^2 + 14.72 \left(\frac{a}{w}\right)^3 - 5.6 \left(\frac{a}{w}\right)^4\right) \quad (۳-۴)$$

در روابط بالا w عرض نمونه، a طول ترک اولیه، B ضخامت نمونه و F مقدار بار نقطه‌ای می‌باشد. در تست‌های آزمایشگاهی که در این تحقیق برای کالیبره کردن پارامترها از آن‌ها استفاده شده است، این

1 Compact Tension (CT)

مقادیر برای نمونه‌های مورد بررسی برابر با عرض ۲۵ mm، طول ترک اولیه ۱۲٫۵ mm و ضخامت ۱۲٫۵ mm می‌باشد. برای این ابعاد پارامتر f ، رابطه (۳-۴)، مقدار ۹٫۶۶ را می‌دهد. همچنین تست‌های آزمایشگاهی به صورت بار ثابت و با ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ بوده‌اند که طبق رابطه (۲-۴) برابر با بار ۵۵۲۵ N می‌باشد. در این پژوهش نیز از همین ابعاد و مقدار بار برای کالیبره کردن پارامترها استفاده شده است. همچنین شرایط مرزی غلظت قرار داده شده نیز در شکل ۳-۴ نشان داده شده است. در تست‌ها در مجاورت محیط خورنده، شرایط مرزی دریکله با غلظت ثابت برابر با غلظت محیط خورنده در نظر گرفته شده است و در مرز مقابل شرایط مرزی دریکله با غلظت ثابت برابر با صفر قرار داده شده است. گام زمانی در نظر گرفته شده برای هر مدل‌سازی به گونه‌ای انتخاب شده است که نه به اندازه‌ای بزرگ باشد که از دقت حل عددی کاهش دهد و نه به اندازه کوچک باشد که با کاهش بیشتر دقت حل عددی تفاوتی نکند و فقط هزینه محاسباتی بیشتر شود.



شکل ۴-۳- نمای کلی نمونه فشرده کششی و شرایط مرزی غلظت قرار داده شده.

همان طور که بیان شد دو نوع فولاد پلی‌کریستال که به دلیل مقاومت بالا در برابر خوردگی در رآکتورهای آب سبک به صورت گسترده استفاده می‌شود آلیاژ پایه نیکل و فولاد ضد زنگ می‌باشد. به طور معمول بر روی این مواد قبل از استفاده در اجزا و تجهیزات مقادیر مختلفی نورد سرد انجام می‌شود که باعث بالا رفتن تنش تسلیم مواد می‌شود و می‌تواند باعث افزایش تنش تسلیم تا بالای ۵۵۰ MPa شود؛ اما طبق گزارش‌های متعدد افزایش مقدار نورد سرد انجام شده با افزایش نرخ رشد ترک رابطه مستقیم دارد. در این پژوهش بررسی‌های انجام شده بر روی مواد با ۲۰٪ نورد سرد انجام شده است.

طبق پژوهش‌های میلز^۱ [۱۲۴] درباره خواص مکانیکی فولاد ضد زنگ، میلز و براون^۲ [۱۲۵] بر روی خواص مکانیکی آلیاژ پایه نیکل، و مدل‌سازی عددی انجام شده در زمینه IGSCC برای این مواد توسط سدلاک و همکاران^۳ [۱۵]، برای پارامترهای مربوط به خواص مکانیکی فولاد ضد زنگ با ۲۰٪ نورد سرد و آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ مقادیر بیان شده در جدول ۴-۱ در نظر گرفته شده است.

جدول ۴-۱ - پارامترهای مکانیکی در نظر گرفته شده برای مواد مورد بررسی.

پارامتر	یکا	مقدار مربوطه برای آلیاژ پایه نیکل	مقدار مربوطه برای فولاد ضد زنگ
E	GPa	196	196
ν	-	0.27	0.27
ϕ_n	N/mm	280	400
δ_n	mm	0.0515	0.0735
T_n	MPa	2000	2000

محیط‌های آبی متفاوت مورد استفاده در صنعت خواص محیطی و شیمیایی متفاوتی دارند و هر کدام از محیط‌های BWR و PWR ترکیب‌بندی‌های شیمیایی خود را دارند. در محیط BWR به طور معمول آب دارای خلوص بالا می‌باشد و یون‌های فلزی و یون‌های سولفید و کلرید محلول در این محیط موجود نمی‌باشد؛ همچنین مقدار غلظت هیدروژن محلول در این محیط نیز بسیار پایین می‌باشد. اما در این محیط غلظت اکسیژن محلول، که عامل اصلی زنگ‌زدگی است، بالا است و بین ۱۰۰ ppb و ۲۰۰ ppb می‌باشد. در محیط PWR غلظت اکسیژن محلول پایین است و کمتر از ۵ ppb می‌باشد، اما در مقابل غلظت هیدروژن و همچنین یون‌های فلزی محلول و یون‌های سولفید و کلرید محلول، که اغلب نقش کاتالیزور را برای زنگ‌زدگی ایفا می‌کنند، بسیار بالا می‌باشد [۵]. دمای عملیاتی در هر دو محیط به طور معمول بین ۲۸۰ تا ۲۹۰ درجه سانتیگراد می‌باشد. همان طور که در فصل ۲ بیان شد، IGSCC پدیده‌ای پیچیده می‌باشد و متأثر از عوامل زیادی است و هنوز پویایی بین عوامل به طور کامل شناخته شده نیست. به دلیل همین امر و متفاوت بودن ریزساختارها در مواد مختلف و ترکیب شیمیایی متفاوت در محیط‌های مختلف، برای هر کدام از ترکیب‌های ماده-محیط نرخ رشد ترک متفاوتی گزارش شده است؛ از این رو در این پژوهش پارامترها برای چهار ترکیب ماده-محیط، با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی مربوط به هر کدام، کالیبره شده است. پارامتر تاثیرگذار در انتشار به کمک تنش، یعنی

1 Mills

2 Mills and Brown

3 Sedlak et. al.

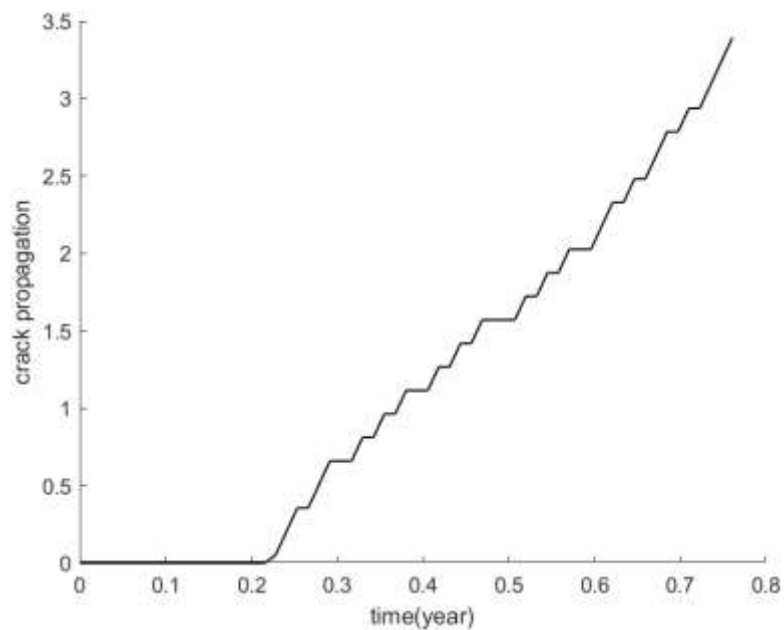
حجم مولی جزئی اکسیژن در فلز (V_{O2})، نیز بر اساس مقادیر موجود در مدل‌سازی عددی انجام شده در زمینه IGSCC [۱۲۶] برابر با $1.5 \times 10^{-5} \text{ mm}^3/\text{mol}$ در نظر گرفته شده است.

۴-۳-۱- آلیاژ پایه نیکل در محیط BWR

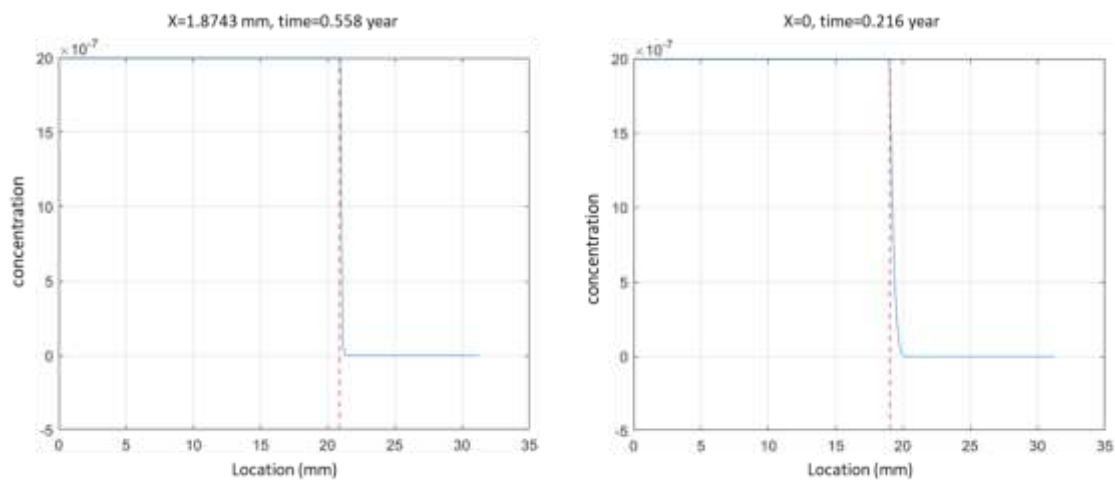
برای ترکیب آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای ۲۰٪ نورد سرد در محیط راکتور آب جوشان (BWR)، داده‌های آزمایشگاهی مرجع در پژوهش آندرسن^۱ [۵]، نرخ رشد ترکی در حدود $2 \times 10^{-7} \text{ mm/s}$ را در آب با خلوص بالا و دارای ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول نشان می‌دهند. پارامترهای کالیبره شده مدل برای بازتولید این نرخ رشد در جدول (۴-۲) بیان شده‌اند و نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از این پارامترها در شکل ۴-۴ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار $1.95 \times 10^{-7} \text{ mm/s}$ می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۵ بیان شده است و کانتورهای تنش در راستای عمودی در مقدار رشد ترک‌های متفاوت در شکل ۴-۶ آورده شده است. همچنین شکل ۴-۷ حالت تغییر شکل یافته نمونه بعد از پیش‌روی ترک به اندازه $x=3.39 \text{ mm}$ یعنی به اندازه ۰.۲۷ طول ترک اولیه را نشان می‌دهد؛ همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود، پیش‌روی ترک بدون حضور تغییر شکل قابل توجه می‌باشد که تصدیق‌کننده رفتار ترد ماده در پدیده IGSCC می‌باشد. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰.۱۲۷ سال می‌باشد.

جدول ۴-۲- پارامترهای کالیبره شده مدل برای ترکیب‌های ماده-محیط استفاده شده در صنعت.

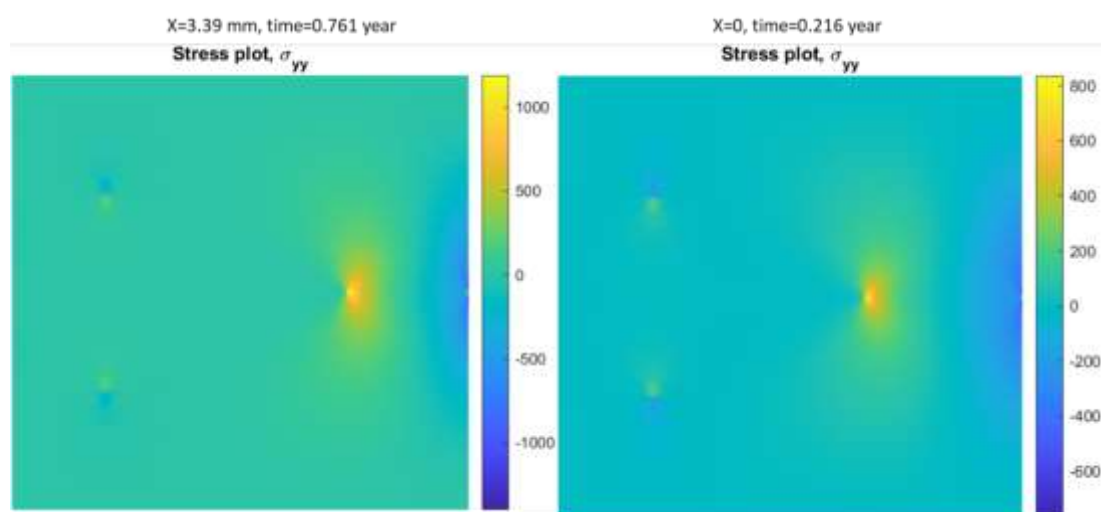
پارامتر	آلیاژ پایه نیکل - BWR	فولاد ضد زنگ - BWR	آلیاژ پایه نیکل - PWR	فولاد ضد زنگ - PWR
$D_s \text{ (mm}^2/\text{s)}$	8.75×10^{-9}	8×10^{-9}	18×10^{-9}	8×10^{-9}
C_{char}	10^{-12}	10^{-13}	10^{-15}	4×10^{-12}
d_{O2}	0.99	0.99	0.999	0.99
d_δ	0.9	0.9	0.92	0.925



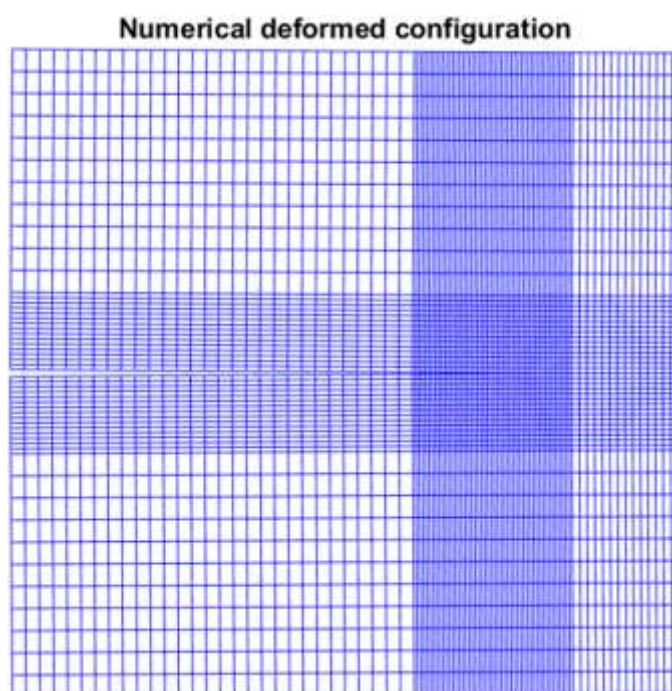
شکل ۴-۴- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.



شکل ۴-۵- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.



شکل ۴-۶- کانتورهای تنش راستای عمودی در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول.



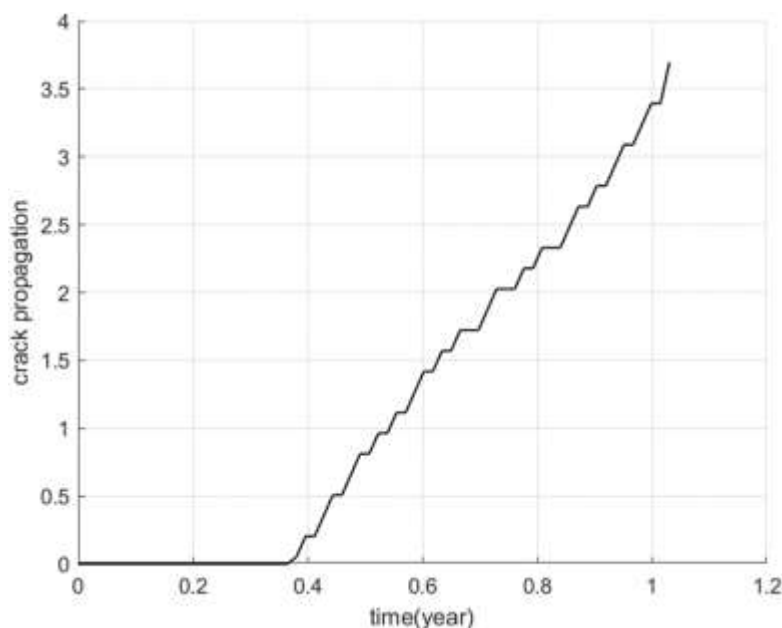
شکل ۴-۷- حالت تغییر شکل یافته نمونه بعد از پیش‌روی ترک به اندازه ۳,۳۹ mm برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول.

همان‌طور که در شکل ۴-۵ دیده می‌شود در هنگام شروع ترک خوردگی مقدار نفوذ یون‌های خورنده در جلوی نوک ترک، به دلیل در دست داشتن زمان بیشتر برای پیش‌روی ترک، بیشتر از مقدار نفوذ یون‌های خورنده در جلوی نوک ترک در میانه‌های پیش‌روی نوک ترک می‌باشد. همچنین با پیش‌روی

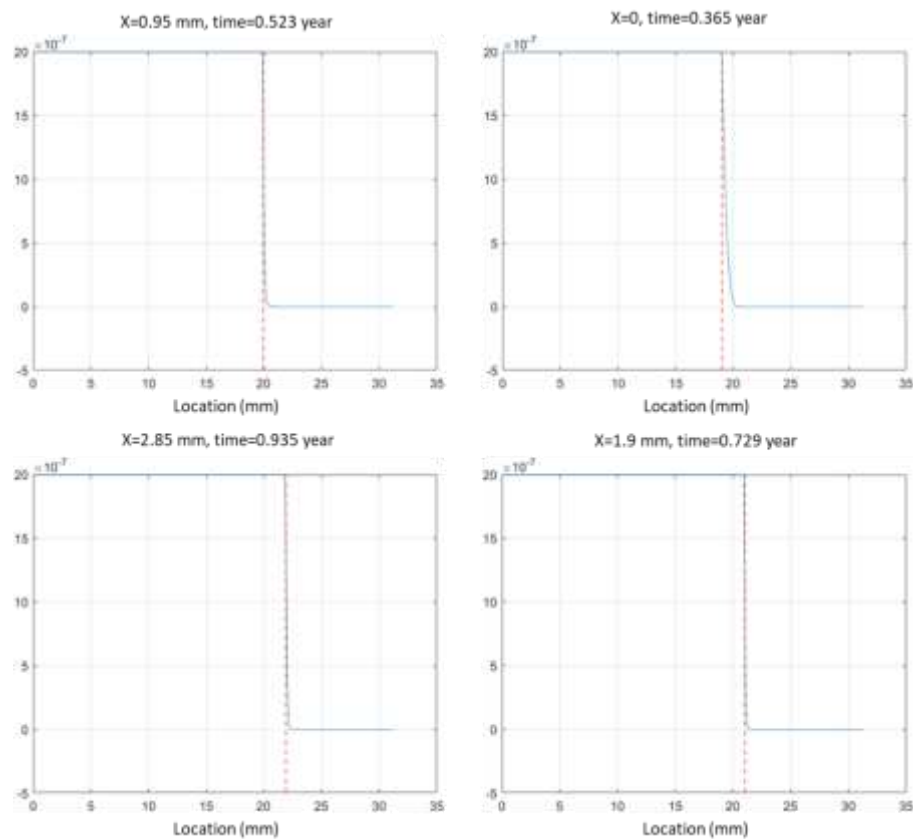
نوک ترک، مقدار یون‌های خورنده در نقاط ترک خورده به اندازه غلظت محیط خورنده می‌باشد که تایید کننده صحت پیاده‌سازی شرایط مرزی متحرک انتشار، مطابق روابط بیان شده در فصل ۳ می‌باشد. در شکل ۴-۶ نیز اثرات افزایش طول ترک و به طبع آن افزایش ضریب شدت تنش با بار ثابت دیده می‌شود.

۴-۳-۲- فولاد ضد زنگ در محیط BWR

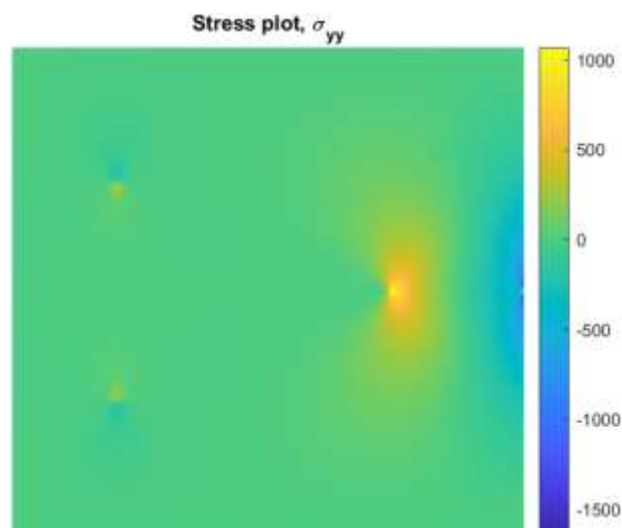
برای فولاد ضد زنگ دارای ۲۰٪ نورد سرد در شرایط مشابه محیط BWR و با اکسیژن محلول ۲۰۰۰ ppb، داده‌های آزمایشگاهی موجود در پژوهش آندرسن [۵] نرخ رشد ترکی برابر با 1.6×10^{-7} mm/s را گزارش کرده‌اند. با استفاده از خواص مکانیکی مربوط به این فولاد و تکرار فرآیند کالیبراسیون برای پارامترهای شیمیایی-مکانیکی، پارامترهای کالیبره شده مدل برای بازتولید این نرخ رشد در جدول ۴-۲ بیان شده‌اند و نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از این پارامترها در شکل ۴-۸ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار 1.6×10^{-7} mm/s می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۹ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک به مقدار $x=2.85$ mm در شکل ۴-۱۰ آورده شده است. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰,۰۱۵۸ سال می‌باشد.



شکل ۴-۸- مقدار رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.



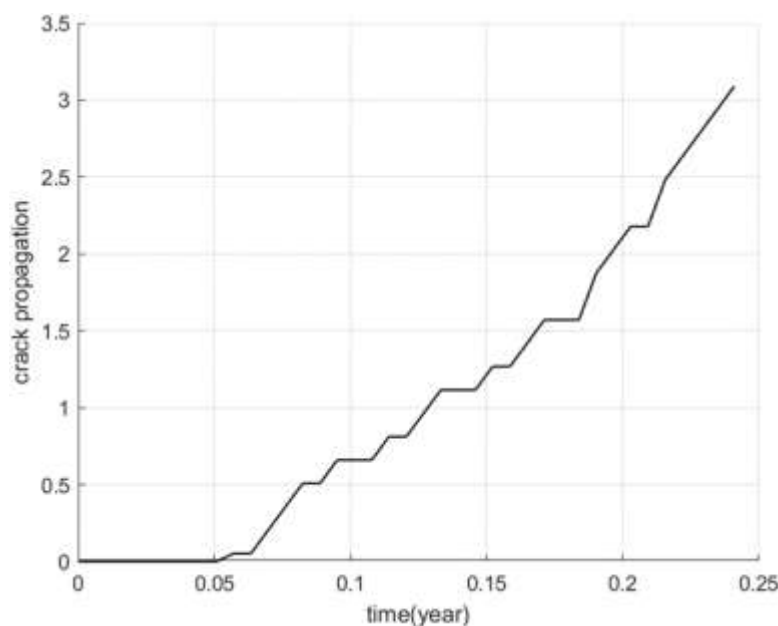
شکل ۴-۹- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.



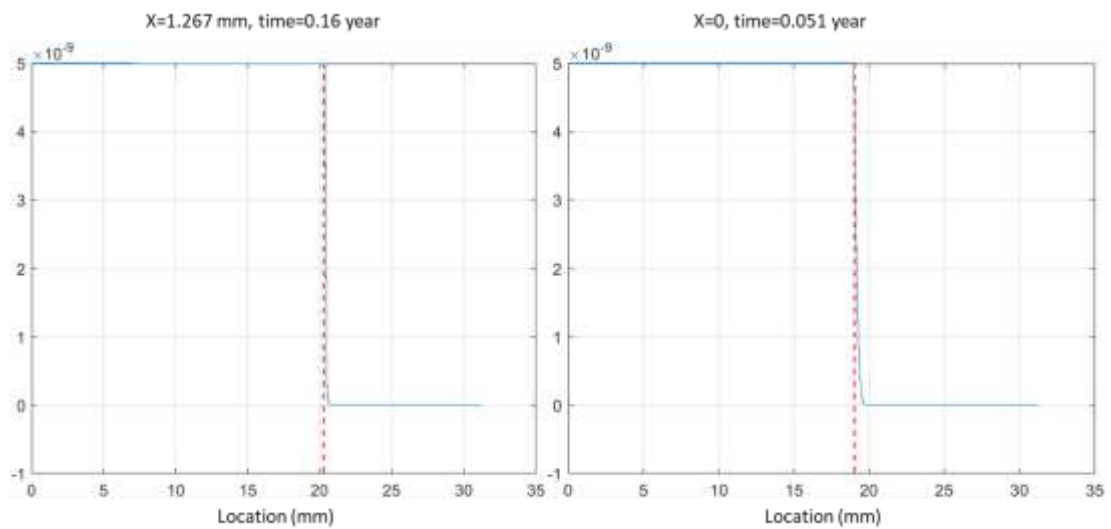
شکل ۴-۱۰- کانتور تنش راستای عمودی برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه 2.85 mm .

۳-۳-۴- آلیاژ پایه نیکل در محیط PWR

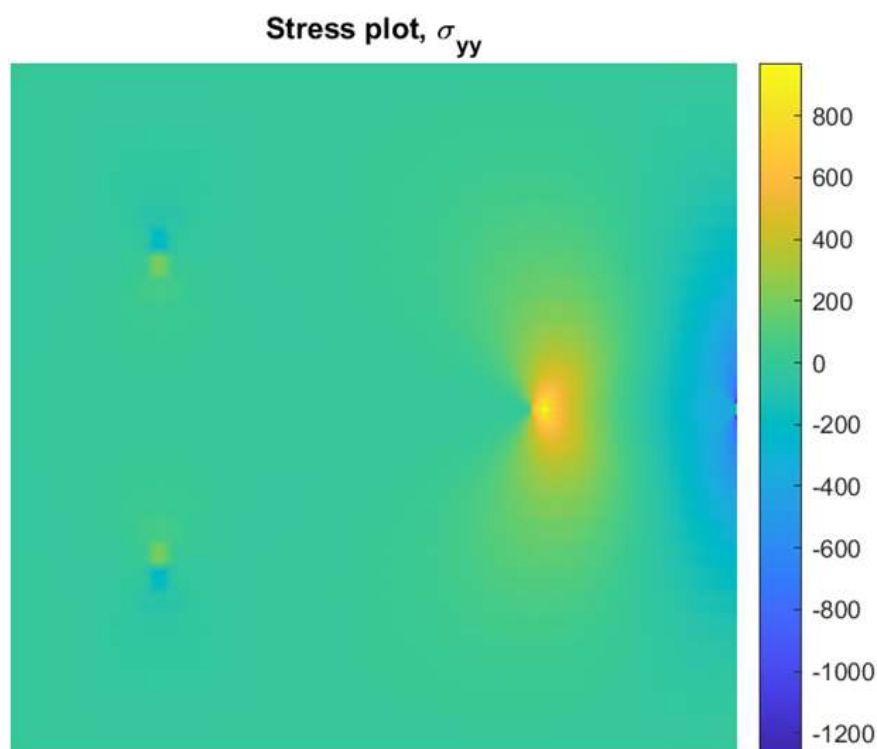
همان طور که بیان شد محیط PWR از نظر شیمیایی با محیط BWR متفاوت می‌باشد، به ویژه در غلظت اکسیژن محلول، که حدود ۵ ppb می‌باشد، به همین دلیل اندرکنش محیط با مواد مختلف، متفاوت می‌باشد و نرخ رشد ترک‌های متفاوتی را حاصل می‌شود. طبق پژوهش اشپیدل و مدوفسکی^۱ [۱۲۷] نرخ رشد ترک برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای ۲۰٪ نورد سرد در این محیط به اندازه 7×10^{-7} mm/s می‌باشد. با استفاده از خواص مکانیکی مربوط به این فولاد و تکرار فرآیند کالیبراسیون برای پارامترهای شیمیایی-مکانیکی، پارامترهای کالیبره شده مدل برای بازتولید این نرخ رشد در جدول ۲-۴ بیان شده‌اند و نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از این پارامترها در شکل ۴-۱۱ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار $7,6 \times 10^{-7}$ mm/s می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۱۲ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک به مقدار $x=3,1$ mm در شکل ۴-۱۳ آورده شده است. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰,۰۰۶۳ سال می‌باشد.



شکل ۴-۱۱- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.



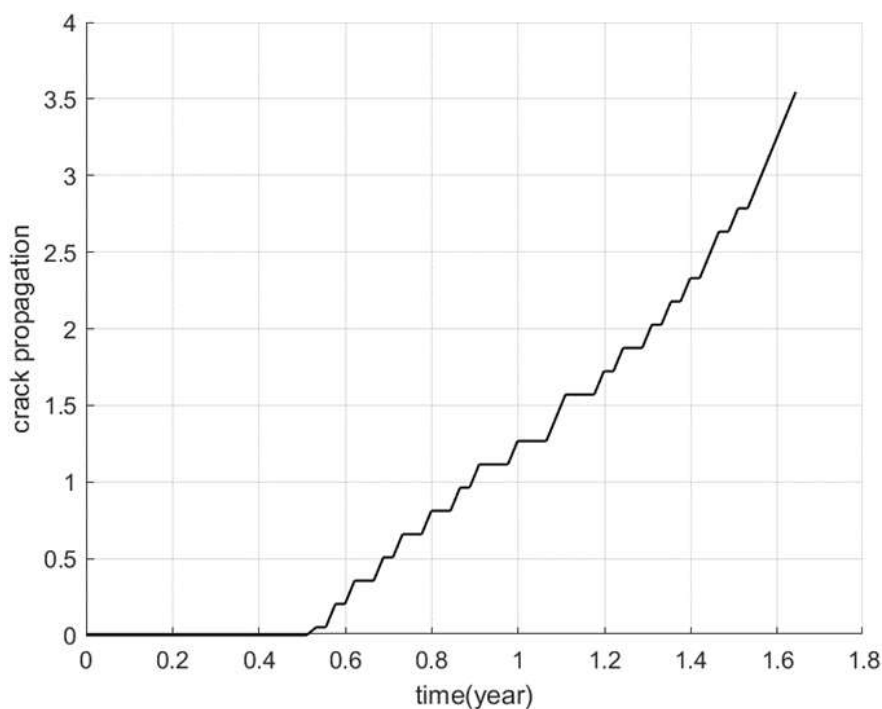
شکل ۴-۱۲- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $2.7 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.



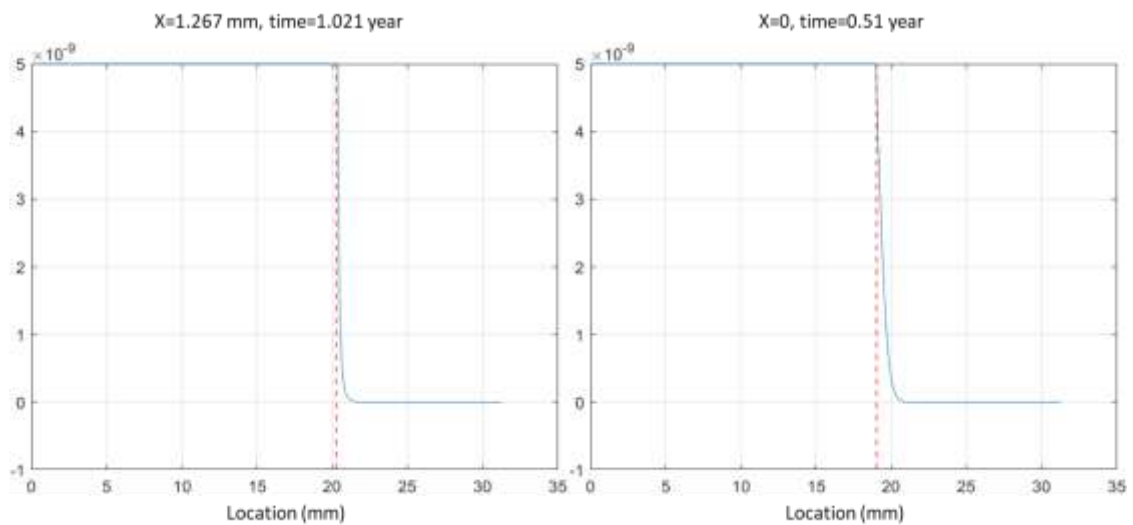
شکل ۴-۱۳- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه ۳,۱ mm.

۴-۳-۴- فولاد ضد زنگ در محیط PWR

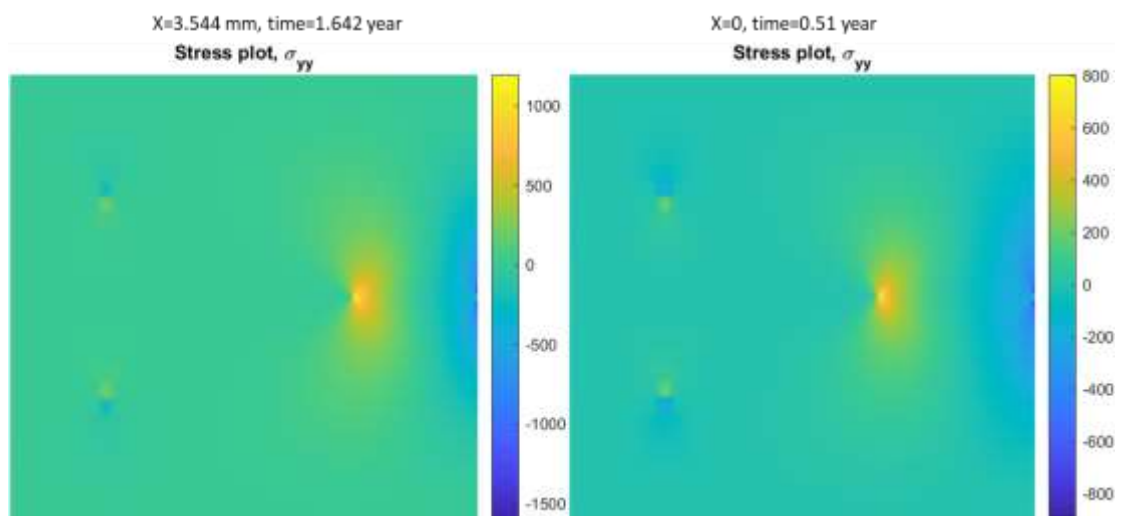
در نهایت، سیستم فولاد ضد زنگ دارای ۲۰٪ نورد سرد در محیط PWR مورد بررسی قرار گرفت. داده‌های آزمایشگاهی برای ترکیب فولاد ضد زنگ و محیط PWR، طبق پژوهش تراکی و همکاران^۱ [۱۲۸] نرخ رشد ترک در حدود 8×10^{-8} mm/s را نشان می‌دهند. با استفاده از خواص مکانیکی مربوط به این فولاد و تکرار فرآیند کالیبراسیون برای پارامترهای شیمیایی-مکانیکی، پارامترهای کالیبره شده مدل برای بازتولید این نرخ رشد در جدول ۴-۲ بیان شده‌اند و نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از این پارامترها در شکل ۴-۱۴ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار $8,6 \times 10^{-8}$ mm/s می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۱۵ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک در زمان‌های متفاوت در شکل ۴-۱۶ آورده شده است. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰,۰۲۲۲ سال می‌باشد.



شکل ۴-۱۴- مقدار رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.



شکل ۴-۱۵- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.



شکل ۴-۱۶- کانتورهای تنش راستای عمودی در زمان‌های متفاوت برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ۵ ppb اکسیژن محلول.

۴-۴- اعتبار سنجی مدل

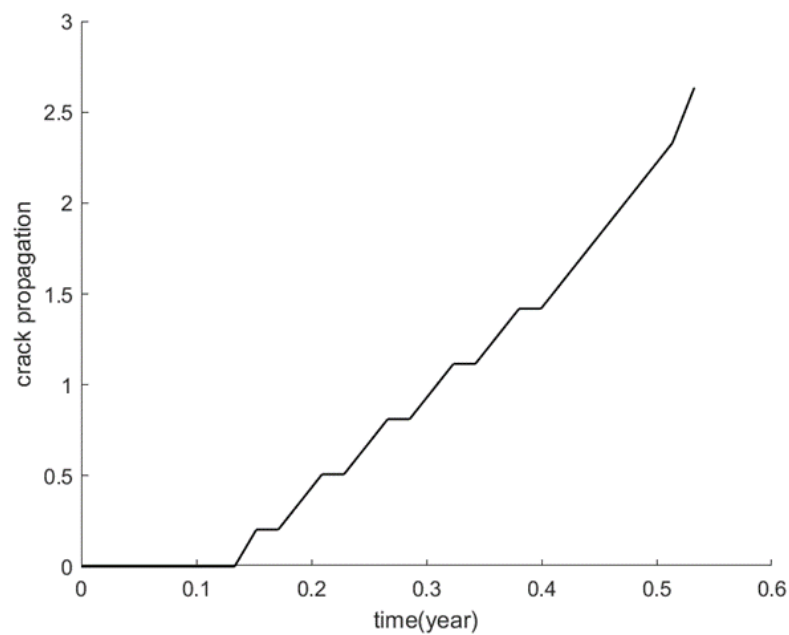
مهم‌ترین آزمون برای هر مدل پیش‌بینی‌کننده، توانایی آن در تخمین رفتار سیستم تحت شرایطی است که برای آن کالیبره نشده است. فرآیند اعتبارسنجی دقیقاً به همین منظور طراحی شده است. در این

بخش، از پارامترهای کالیبره شده در بخش ۴-۳ برای پیش‌بینی نرخ رشد ترک تحت شرایط بارگذاری مکانیکی و شیمیایی جدید استفاده می‌شود و نتایج با داده‌های آزمایشگاهی مستقل مقایسه می‌گردد. موفقیت در این مرحله، نشان‌دهنده آن است که مدل صرفاً یک منحنی را برازش نکرده، بلکه فیزیک حاکم بر پدیده IGSCC را به درستی ثبت کرده است.

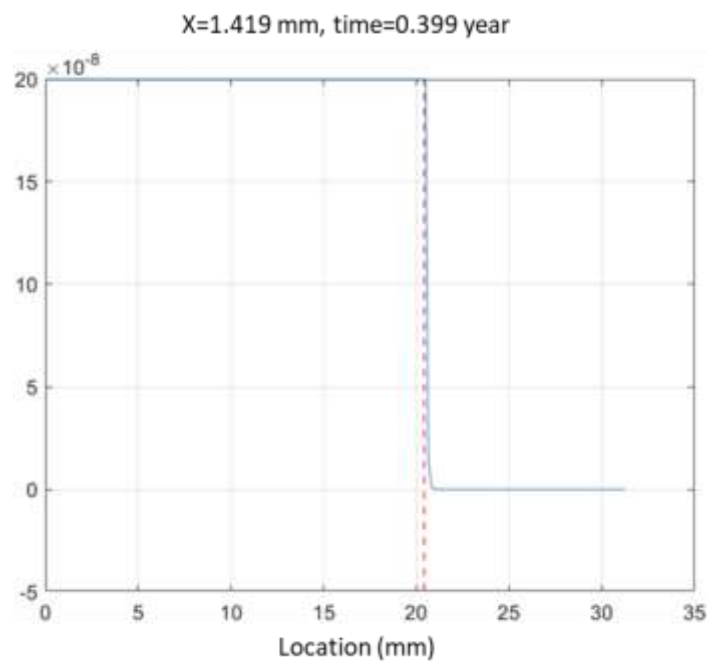
۴-۴-۱- پیش‌بینی تأثیر غلظت اکسیژن محلول

در این آزمون، قابلیت مدل برای پیش‌بینی اثر تغییر در شیمی محیط ارزیابی شد. با استفاده از مجموعه پارامترهای کالیبره شده برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای ۲۰٪ نورد سرد در محیط BWR (که برای غلظت ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول تنظیم شده بود)، یک شبیه‌سازی جدید با غلظت اکسیژن کاهش‌یافته به ۲۰۰ ppb و ضریب شدت تنش اندکی بالاتر ($K=31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$) انجام شد. داده‌های آزمایشگاهی موجود در پژوهش آندرسن [۵] برای این شرایط، نرخ رشد ترکی در حدود $2 \times 10^{-7} \text{ mm/s}$ را گزارش کرده‌اند.

شبیه‌سازی مدل، بدون هیچ‌گونه تنظیم مجدد پارامترها، همان طور که در شکل ۴-۱۷ دیده می‌شود، نرخ رشد ترکی برابر با $1.95 \times 10^{-7} \text{ mm/s}$ را نتیجه داد. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰.۰۱۹ سال می‌باشد. این تطابق نزدیک بین مقدار پیش‌بینی شده و مقدار آزمایشگاهی، توانایی مدل در تطبیق‌پذیری برای شرایط مختلف و پیش‌بینی صحیح پاسخ ماده به تغییرات در محیط خوردنده را نشان می‌دهد. همچنین همان طور که در شکل ۴-۱۸ دیده می‌شود میزان نفوذ یون‌های خوردنده در جلوی نوک ترک، توزیع غلظت مشابهی با توزیع غلظت نفوذ کرده در جلوی ترک در طول ترک به نسبت مشابه در شرایط محیطی ۲۰۰۰ ppb، شکل ۴-۵، را دارا است.



شکل ۴-۱۷- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppm اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.



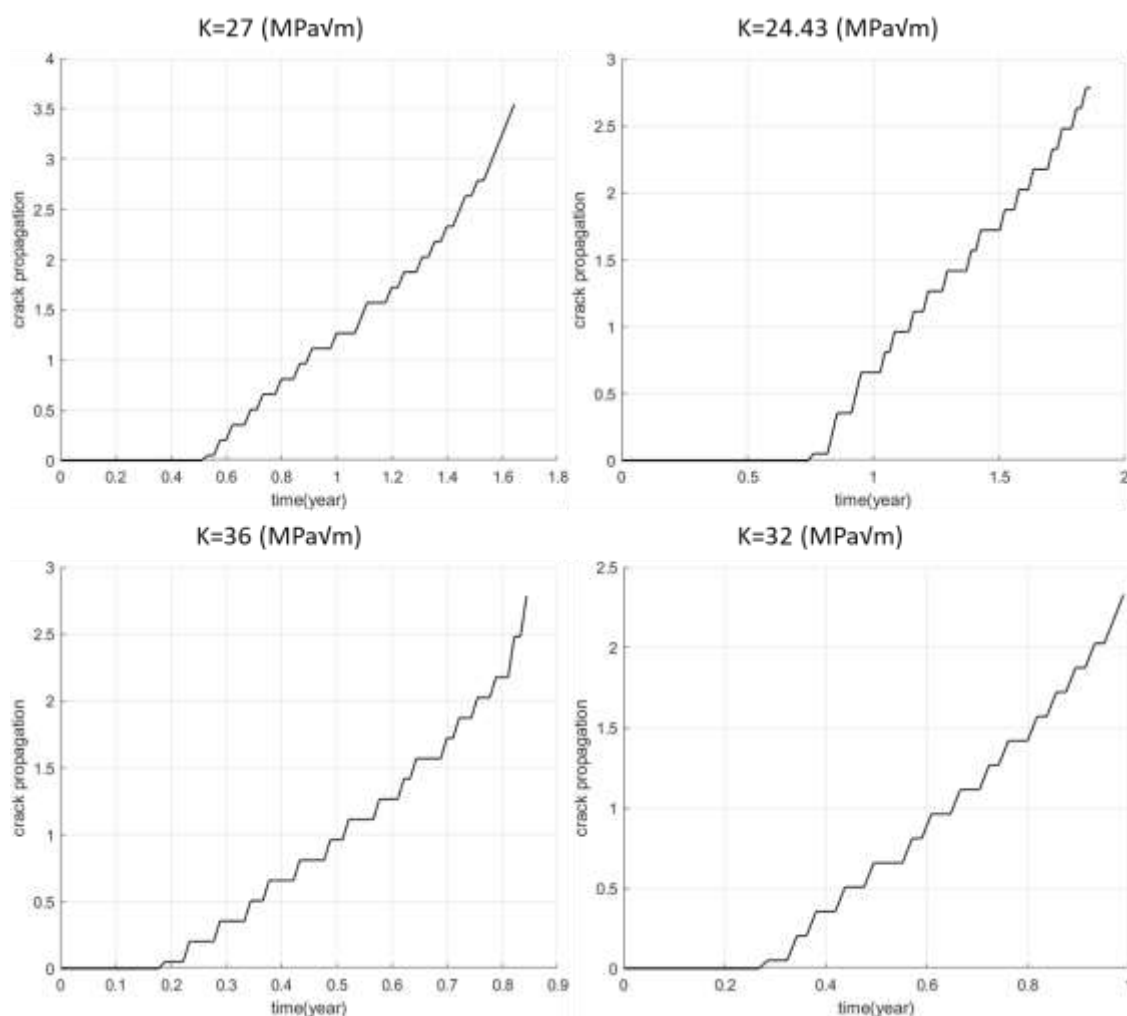
شکل ۴-۱۸- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppm اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.

۴-۴-۲- پیش‌بینی تأثیر ضریب شدت تنش

در آزمون دوم اعتبارسنجی، تمرکز بر روی پیش‌بینی اثر نیروی محرکه مکانیکی بود. با استفاده از پارامترهای کالیبره‌شده برای فولاد ضد زنگ در محیط PWR (که برای $K=27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ کالیبره شده بود)، چندین شبیه‌سازی با مقادیر مختلف ضریب شدت تنش (K) انجام شد. هدف، بررسی این موضوع بود که آیا مدل می‌تواند روند وابستگی CGR به K را که در آزمایش‌ها مشاهده می‌شود، بازتولید کند یا خیر. نتایج شبیه‌سازی‌ها در جدول ۴-۳ خلاصه شده است و رشد ترک در طول زمان برای ضرایب شدت تنش متفاوت در شکل ۴-۱۹ مشاهده می‌شود. در این مدل‌سازی‌ها گام زمانی از کوچک‌ترین ضریب شدت تنش به بزرگ‌ترین ضریب شدت تنش به ترتیب برابر با ۰,۰۱۹ سال، ۰,۰۲۲۲ سال، ۰,۰۱۹ سال و ۰,۰۱۱۱ سال بوده است.

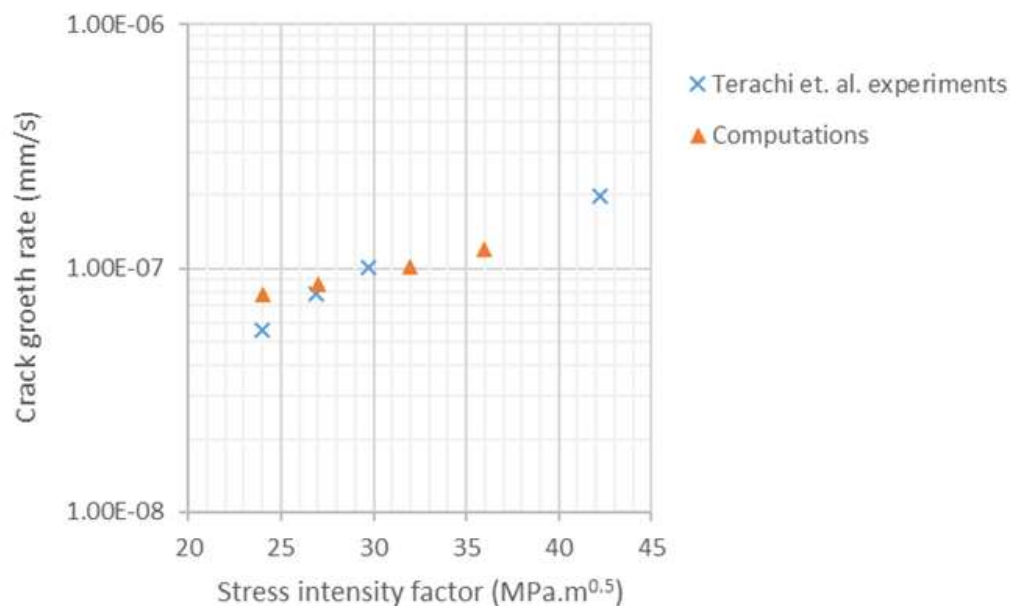
جدول ۴-۳- نتایج نرخ رشد ترک برای ضرایب شدت تنش متفاوت.

ضریب شدت تنش ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)	متوسط نرخ رشد ترک (mm/s)
24.43	7.86×10^{-8}
27	8.6×10^{-8}
32	1.01×10^{-7}
36	1.2×10^{-7}



شکل ۴-۱۹- مقادیر رشد ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR با ppb ۵ اکسیژن محلول و ضرایب شدت تنش متفاوت.

نتایج به وضوح نشان می‌دهند که با افزایش ضریب شدت تنش، نرخ رشد ترک پیش‌بینی شده توسط مدل نیز افزایش می‌یابد. این روند کاملاً با رفتار فیزیکی مورد انتظار و داده‌های آزمایشگاهی گزارش شده در مراجع مطابقت دارد. مقایسه نرخ رشد ترک‌های محاسبه شده توسط مدل با نتایج آزمایشگاهی پژوهش تراکی و همکاران [۱۲۸] در شکل ۴-۲۰ مشاهده می‌شود. این اعتبارسنجی تأیید می‌کند که مدل به درستی همبستگی بین بارگذاری مکانیکی و سینتیک رشد ترک را شبیه‌سازی می‌کند.



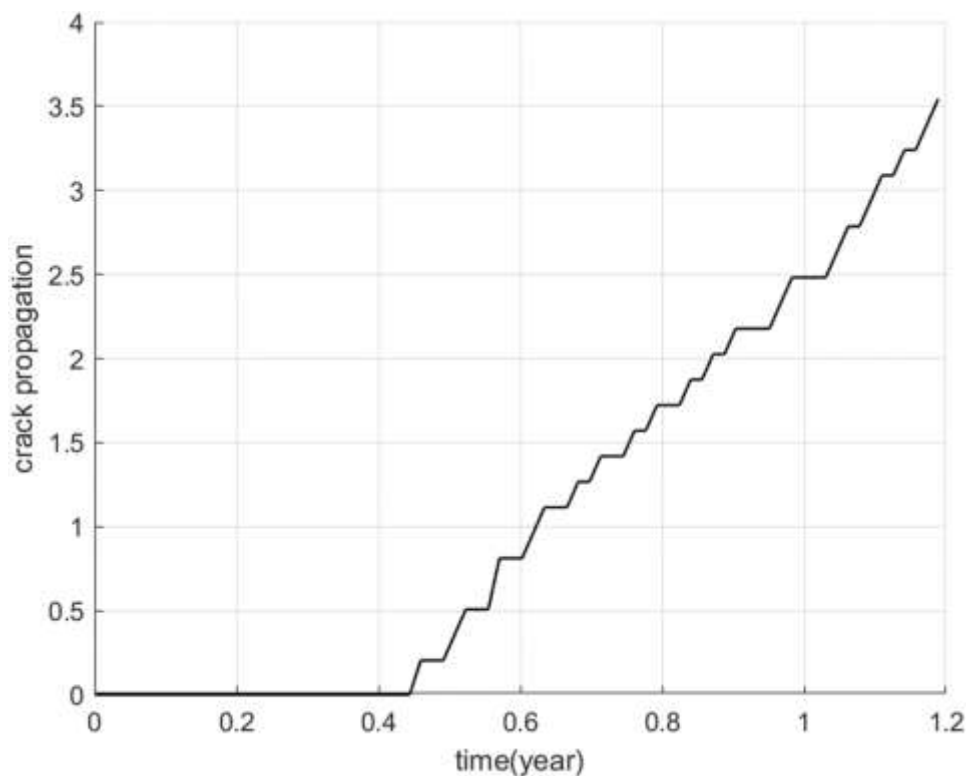
شکل ۴-۲۰- مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی برای اثرات ضریب شدت تنش.

۴-۵- بررسی اثرات انتشار به کمک تنش

مدل المان محدود شیمیایی-مکانیکی همبسته کامل که در این پایان‌نامه توسعه داده شده است، یک عبارت انتشار به کمک تنش را در معادله شار، رابطه (۳-۹)، قرار داده است که منعکس‌کننده تأثیر میدان‌های تنش موضعی بر انتقال گونه‌های خورنده به نوک ترک است. برای ارزیابی اهمیت این مکانیسم همبسته، یک تجزیه و تحلیل مقایسه‌ای با غیرفعال کردن عبارت انتشار به کمک تنش و شبیه‌سازی مجدد انتشار ترک انجام شد. این امر امکان ارزیابی مستقیم تأثیر آن بر نرخ رشد ترک (CGR) و دوره نهفتگی (زمان مورد نیاز برای شروع پیش روی ترک) را فراهم می‌کند.

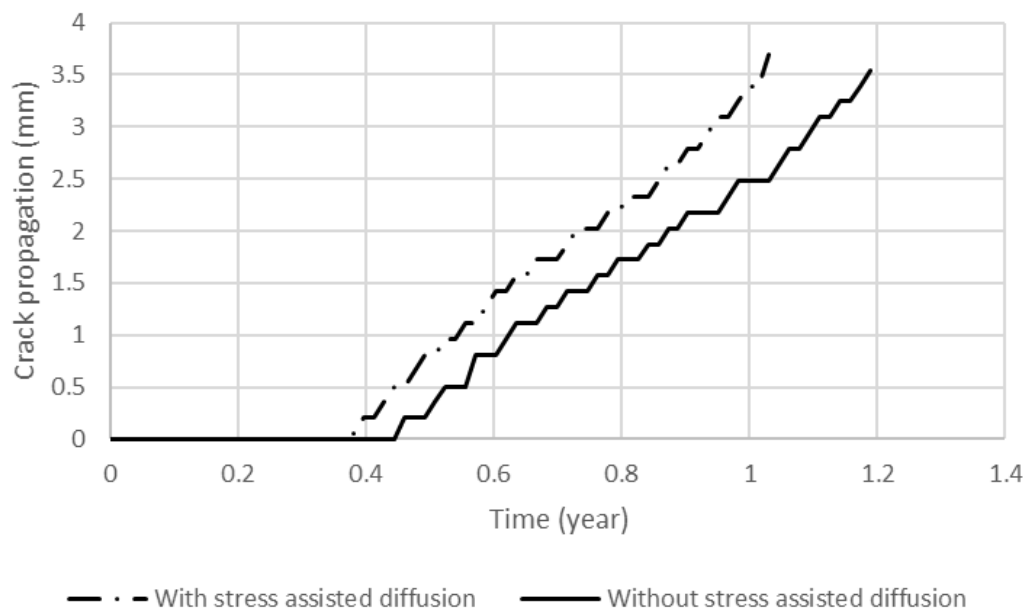
شبیه‌سازی‌های مورد نیاز این مقایسه برای فولاد ضد زنگ در محیط BWR با شرایط محیطی و بارگذاری مشابه با شبیه‌سازی انجام شده در بخش ۴-۳-۲ (اکسیژن محلول ۲۰۰۰ ppb و بارگذاری متناظر با ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$) و با استفاده از پارامترهای کالیبره شده به دست آمده برای این سیستم ماده و محیط انجام شده است. بدین ترتیب می‌توان نتایج به دست آمده از غیرفعال کردن عبارت انتشار به کمک تنش را با نتایج به دست آمده در شکل ۴-۸ مقایسه کرد. با غیر فعال کردن عبارت انتشار به کمک تنش، منحنی پیش‌روی ترک در طول زمان حاصل شده در شکل ۴-۲۱ نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۴-۲۱ نشان داده شده است، غیرفعال کردن انتشار به کمک تنش منجر به نرخ

رشد ترک برابر با 1.45×10^{-7} mm/s شد. علاوه بر این، شروع پیش‌روی ترک در حدود ۰.۴۵ سال مشاهده شد. گام زمانی در این مدل‌سازی به اندازه ۰.۰۱۵۸ سال می‌باشد.



شکل ۴-۲۱- مقدار رشد ترک در طول زمان بدون در نظرگیری عبارت انتشار به کمک تنش برای فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $27 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.

برای مقایسه واضح‌تر، شکل ۴-۲۲ نیز نتایج را با غیرفعال بودن انتشار به کمک تنش (خط ممتد) در مقایسه با نتایج ارائه شده قبلی از بخش ۴-۳-۲ که در آن انتشار به کمک تنش فعال بود (خط نقطه‌چین)، ارائه می‌دهد.



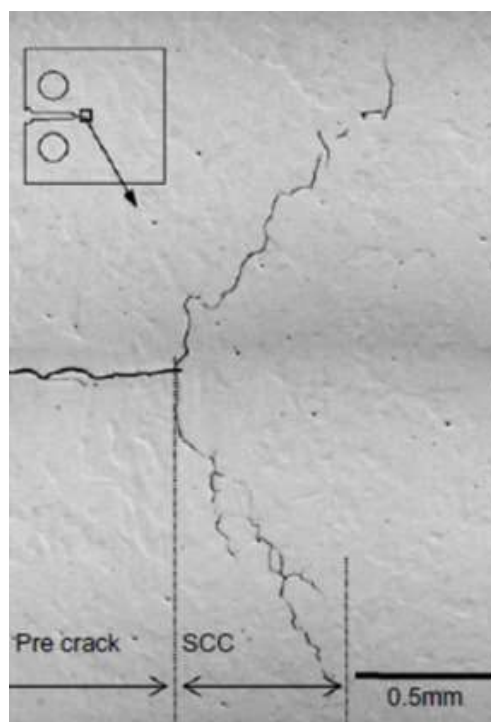
شکل ۴-۲۲- مقایسه پیش‌روی ترک در طول زمان برای فولاد ضد زنگ در محیط BWR با ۲۰۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $۲۷ \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در هنگام فعال بودن و غیرفعال بودن عبارت انتشار به کمک تنش. خط نقطه‌چین نشان دهنده مدل همبسته کامل (فعال بودن انتشار به کمک تنش) و خط ممتد نشان دهنده مدل همبسته جزئی (غیرفعال بودن انتشار به کمک تنش) است.

مقایسه نتایج ارائه شده در شکل ۴-۲۲ تفاوت‌های قابل توجهی را برجسته می‌کند. هنگامی که انتشار به کمک تنش فعال است (مدل کاملاً کوپل شده)، نرخ رشد ترک تقریباً $۱,۶ \times 10^{-۷} \text{ mm/s}$ است و شروع ترک زودتر، حدود ۰,۳۸ سال، رخ می‌دهد. در مقابل، غیرفعال کردن انتشار به کمک تنش (مدل کوپل شده جزئی) CGR را به $۱,۴۵ \times 10^{-۷} \text{ mm/s}$ کاهش می‌دهد و شروع ترک را به ۰,۴۵ سال به تأخیر می‌اندازد. این نشان می‌دهد که انتشار به کمک تنش، هم سرعت انتشار ترک را به طور قابل توجهی افزایش می‌دهد و هم دوره نهفتگی را کاهش می‌دهد.

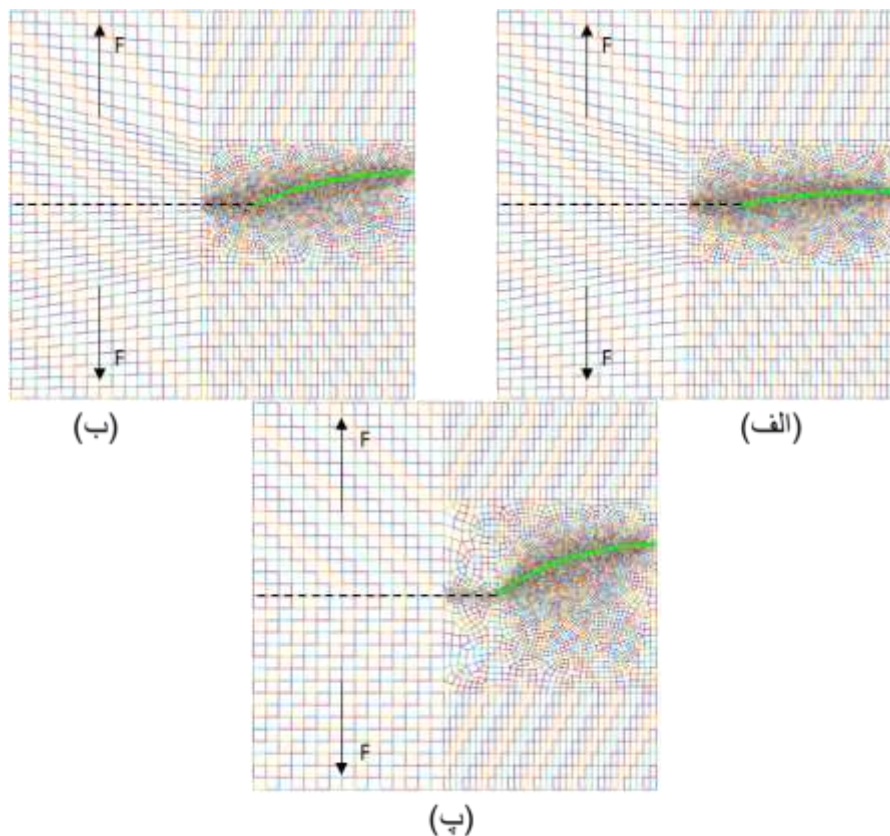
با توجه به این نتایج می‌توان گفت که فرآیند انتشار با غیر فعال بودن انتشار به کمک تنش، به مقدار قابل توجهی کندتر اتفاق می‌افتد. وجود گرادیان‌های تنش در نوک ترک، با تسریع انتقال گونه‌های خوردنده، نقش مهمی در پیش بردن IGSCC ایفا می‌کند. این نتایج بر اهمیت استفاده از یک مدل شیمیایی-مکانیکی کاملاً کوپل شده برای ثبت دقیق تعامل پیچیده بین تنش مکانیکی و تخریب شیمیایی در پدیده IGSCC تأکید می‌کند.

۴-۶- تحلیل مسیر ترک منحنی

همان‌طور که در فصل دوم بیان شد، IGSCC بسیار وابسته به ریز ساختار مواد، به خصوص ساختار مرزهای بین‌دانه‌ای، می‌باشد و این ریزساختارها می‌توانند در نرخ رشد ترک و مسیر رشد ترک مؤثر باشند. به همین دلیل در شروع پیش‌روی ترک، به مانند شکل ۴-۲۳، مسیر پیش‌روی می‌تواند دچار انحراف شود و به صورت موضعی در جهت نرمال بارگذاری پیش‌روی نکند. به همین دلیل در این بخش به تاثیر میزان انحراف در نرخ رشد ترک پرداخته می‌شود و سه مسیر بیان شده در شکل ۴-۲۴ برای پیش‌روی ترک بررسی شده‌اند.



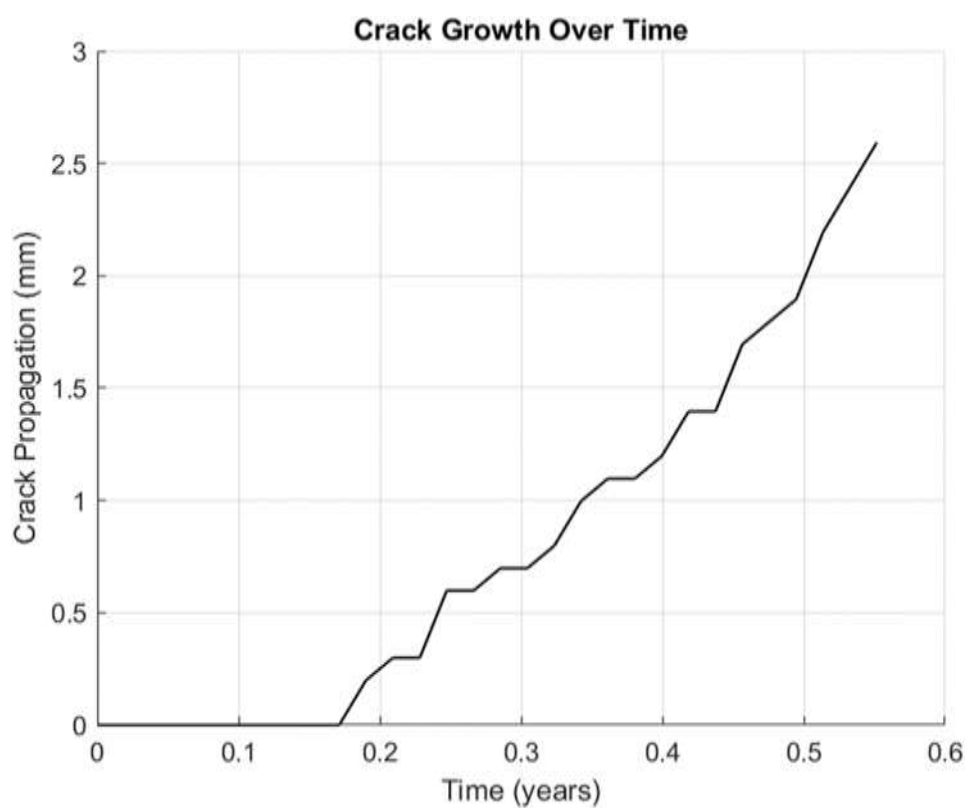
شکل ۴-۲۳- تصویر عرضی رشد ترک در یکی از نمونه‌های آزمایشگاهی بررسی شده فولاد ضد زنگ دارای نورد سرد در محیط PWR [۱۲۸].



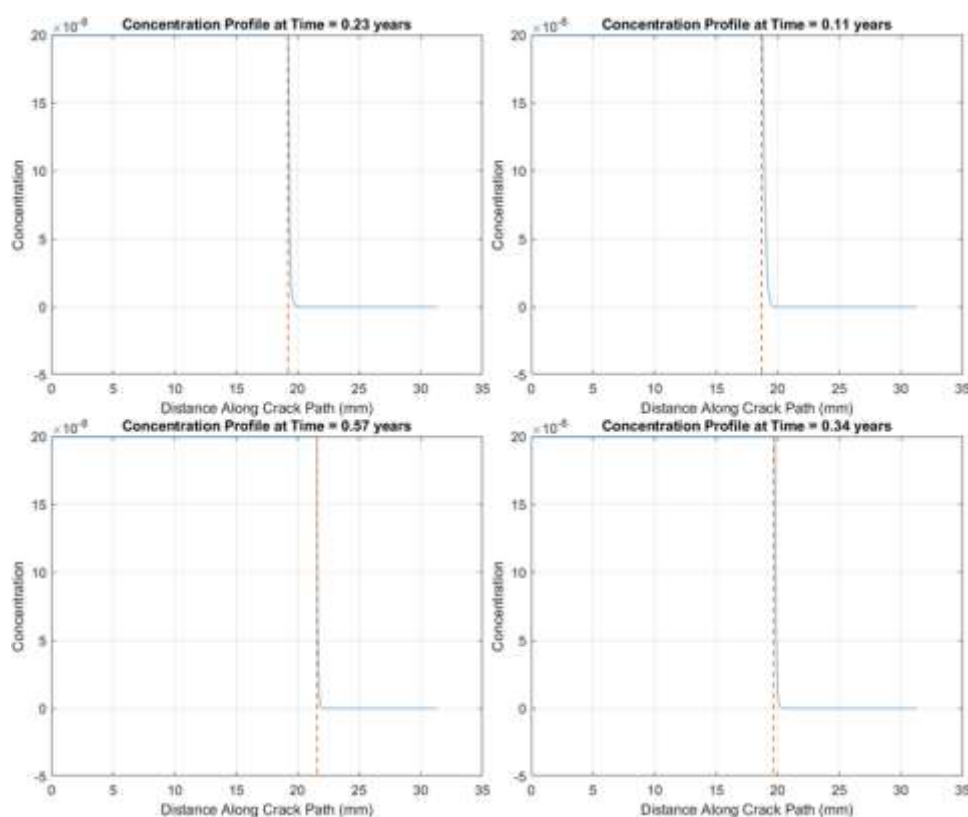
شکل ۴-۲۴-المان بندی نمونه و مسیر پیش‌روی ترک مورد بررسی با: الف) انحراف کم ب) انحراف متوسط و پ) انحراف زیاد نسبت به مسیر مستقیم. خط‌چین سیاه بیان‌گر ترک از پیش موجود و خط سبز بیان‌گر مسیر در نظر گرفته شده برای پیش‌روی ترک می‌باشد و فلش‌های سیاه نشان دهنده محل و جهت بار اعمال شده می‌باشند.

تاثیر میزان انحراف مسیر پیش‌روی ترک در نمونه‌های مورد بررسی با مقایسه نرخ رشد ترک تحت بار و شرایط محیطی یکسان، و مشابه با شرایط و ماده مورد بررسی در بخش ۴-۴-۱ که برای پیش‌روی ترک در مسیر مستقیم بررسی شده بود، برای نمونه‌های مختلف سنجیده شد. همان‌طور که در بخش ۴-۴-۱ بیان شده است ماده مورد مورد بررسی آلیاژ پایه نیکل دارای ۲۰٪ نورد سرد و در محیط BWR با ضریب شدت تنش ($K=31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$) و غلظت محیطی ۲۰۰ ppb می‌باشد. گام زمانی در تمامی این مدل‌سازی‌ها به اندازه ۰,۰۱۹ سال می‌باشد.

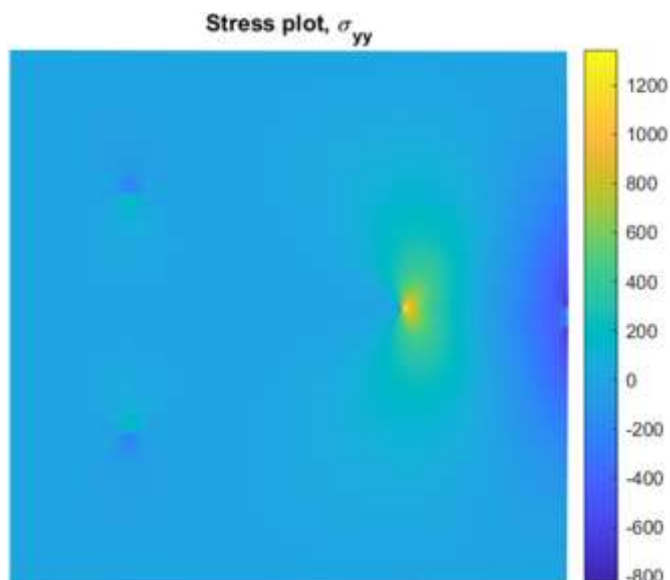
نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از مسیر با انحراف کم در شکل ۴-۲۵ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار $1,92 \times 10^{-7} \text{ mm/s}$ می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۲۶ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک به مقدار $x=2,6 \text{ mm}$ در شکل ۴-۲۷ آورده شده است.



شکل ۴-۲۵- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم.

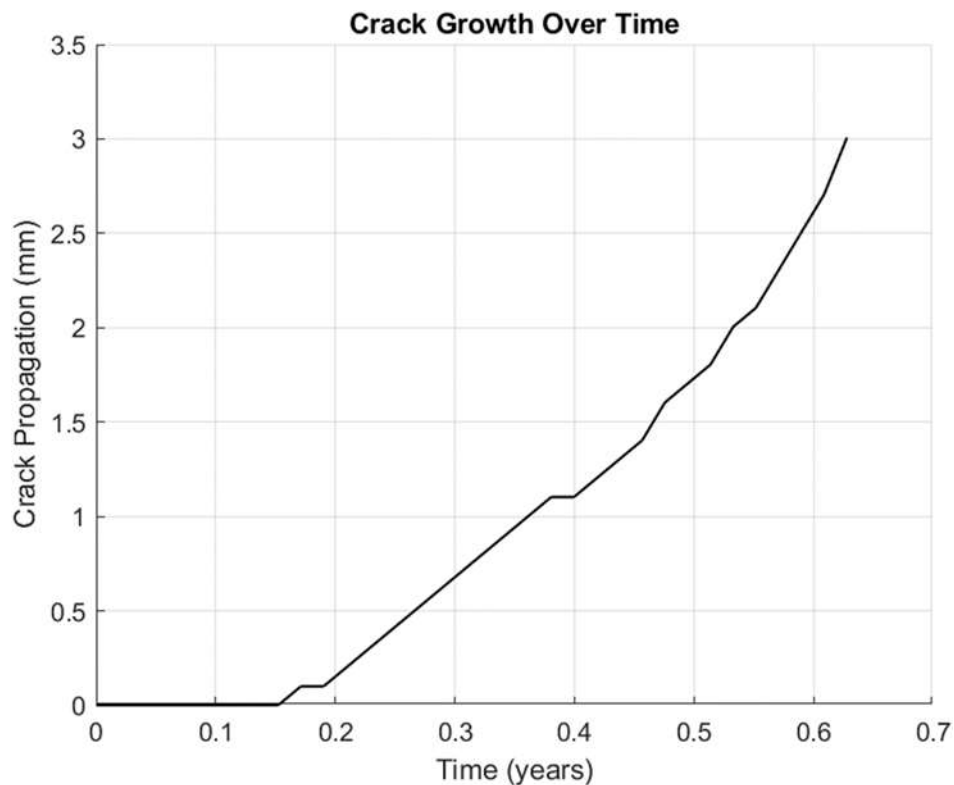


شکل ۴-۲۶- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.

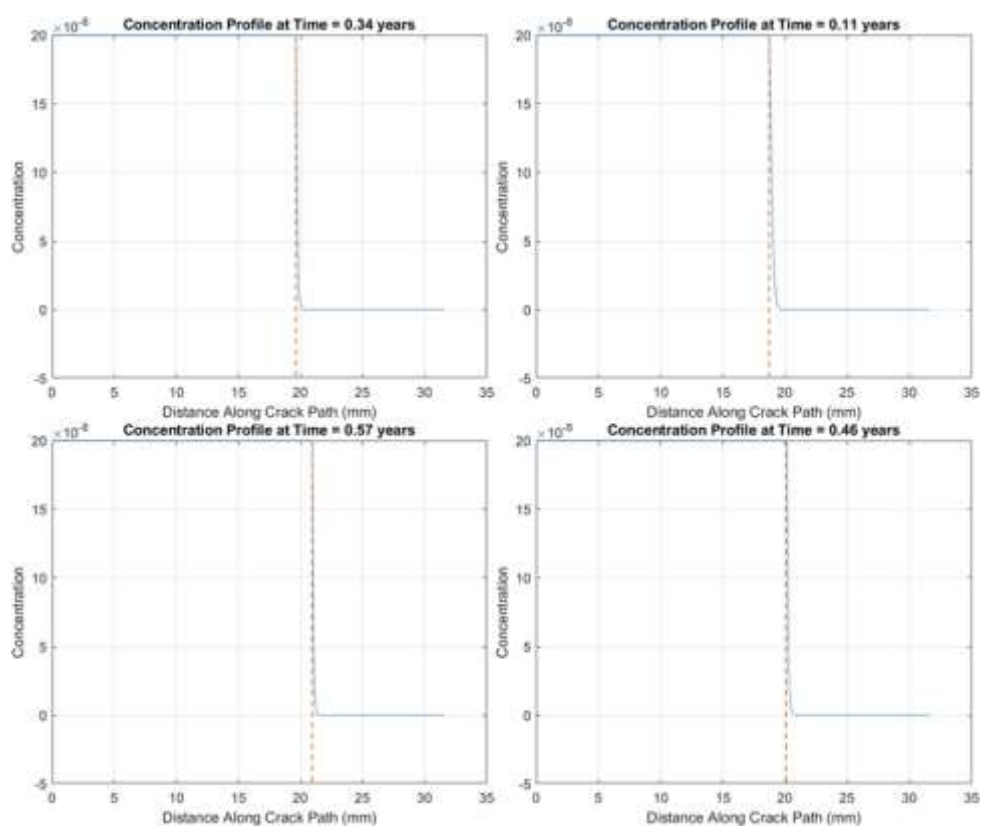


شکل ۴-۲۷- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه ۲,۶ mm در مقدار انحراف کم از مسیر مستقیم.

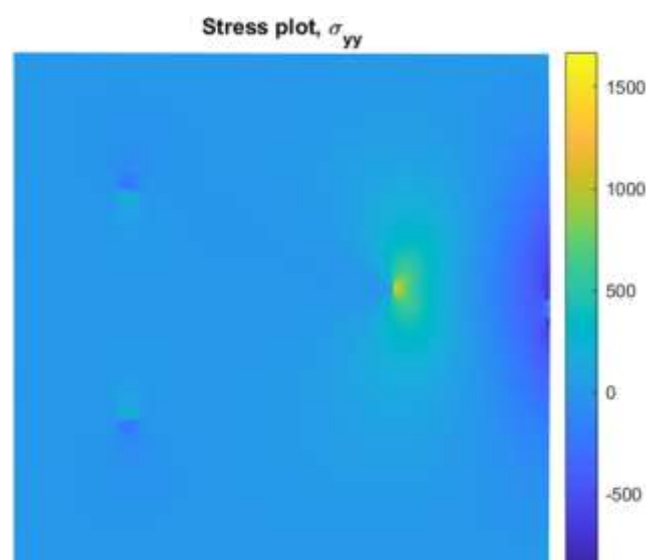
نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از مسیر با انحراف متوسط در شکل ۴-۲۸ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار 1.88×10^{-7} mm/s می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۲۹ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک به مقدار $x=3$ mm در شکل ۴-۳۰ آورده شده است.



شکل ۴-۲۸- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف متوسط / از مسیر مستقیم.

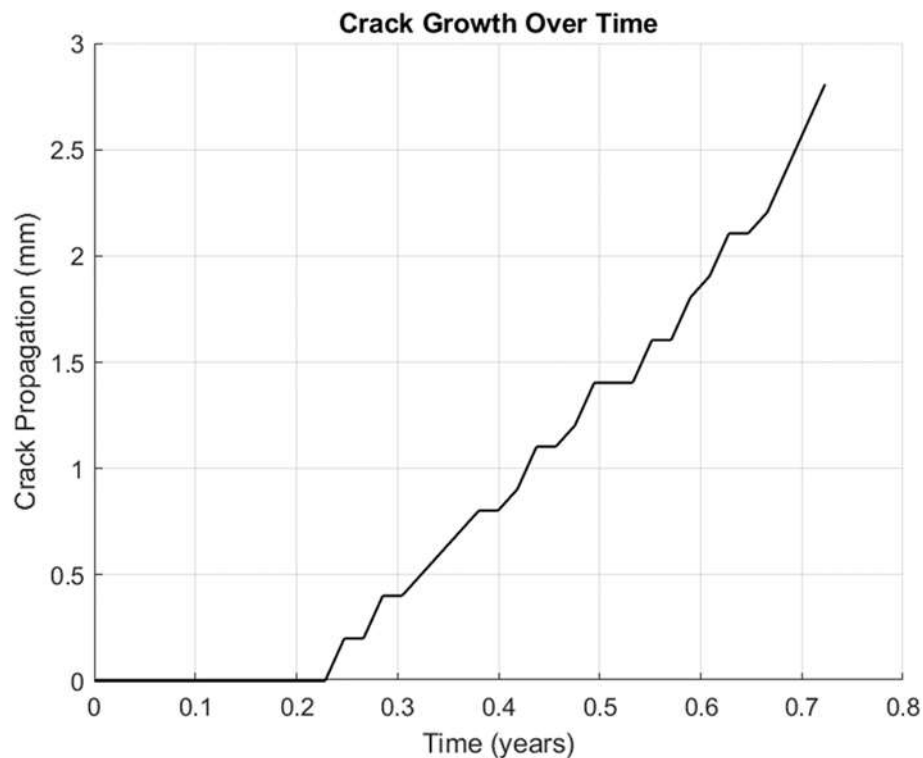


شکل ۴-۲۹- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف متوسط از مسیر مستقیم. خط‌چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.

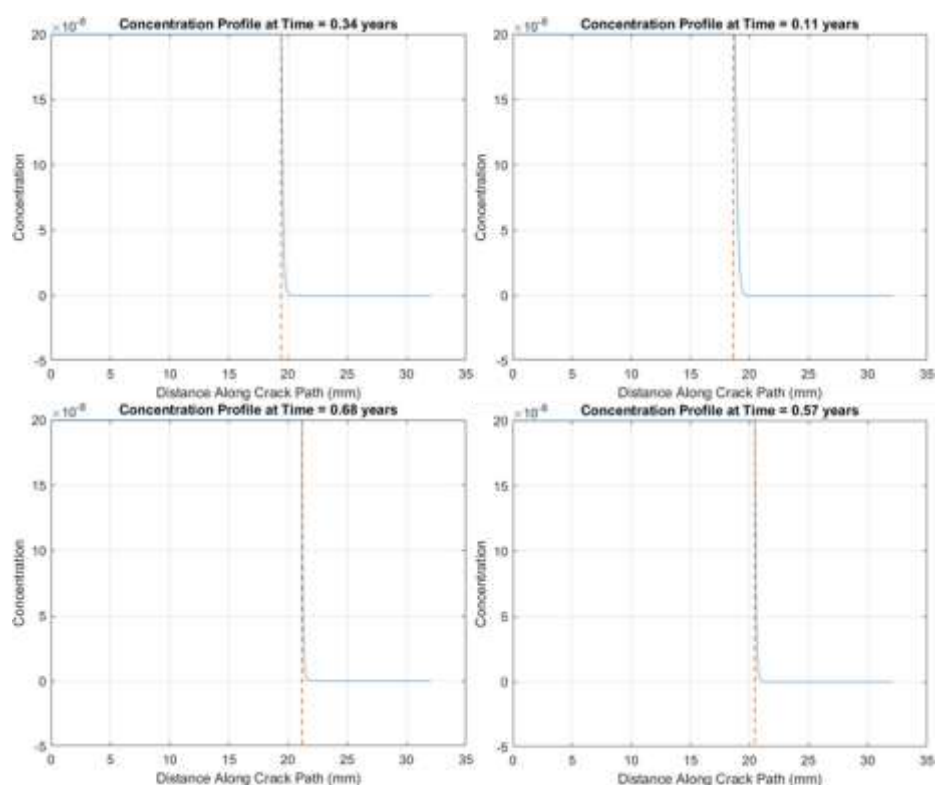


شکل ۴-۳۰- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه ۳ mm در مقدار انحراف متوسط از مسیر مستقیم.

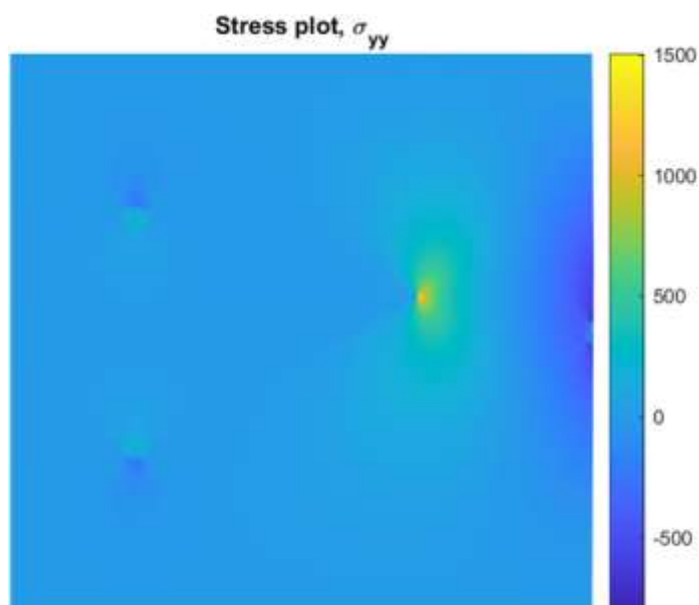
نمودار رشد ترک در طول زمان حاصل شده از مسیر با انحراف زیاد در شکل ۴-۳۱ دیده می‌شود. متوسط نرخ رشد ترک بدست آمده از این نمودار 1.8×10^{-7} mm/s می‌باشد. نمودار مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های مختلف در شکل ۴-۳۲ بیان شده است و کانتور تنش در راستای عمودی در هنگام رشد ترک به مقدار $x=2.8$ mm در شکل ۴-۳۳ آورده شده است.



شکل ۴-۳۱- مقدار رشد ترک در طول زمان برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم.



شکل ۴-۳۲- مقادیر غلظت در راستای طول ترک و مسیر ترک در زمان‌های متفاوت برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.

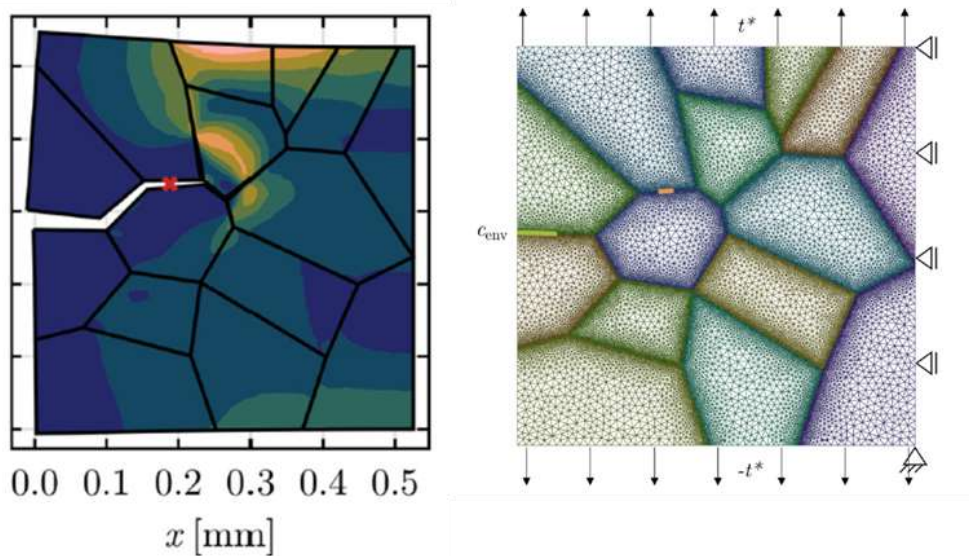


شکل ۴-۳۳- کانتور تنش راستای عمودی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول در هنگام پیش‌روی ترک به اندازه 2.6 mm در مقدار انحراف زیاد از مسیر مستقیم.

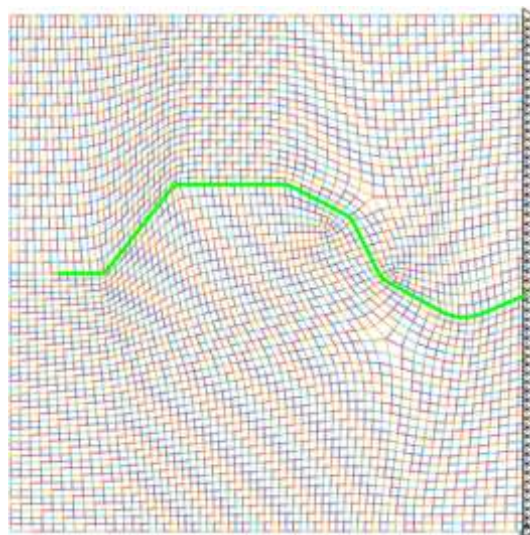
با مقایسه شکل ۴-۱۷ برای مسیر مستقیم، شکل ۴-۲۵ برای مسیر با انحراف کم، شکل ۴-۲۸ برای مسیر با انحراف متوسط و شکل ۴-۳۱ برای مسیر با انحراف زیاد، برای نرخ رشد ترک در آلیاژ پایه نیکل دارای نورد سرد و در محیط BWR با ۲۰۰ ppb اکسیژن محلول و ضریب شدت تنش $31 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ، مشاهده می‌شود که نرخ رشد ترک با افزایش انحراف مسیر پیش‌روی ترک مقداری کاهش پیدا می‌کند. همچنین زمان شروع پیش‌روی ترک نیز افزایش پیدا می‌کند. اما بنا به آن چه که مشاهده می‌شود تأثیر انحراف مسیر در نرخ رشد ترک به اندازه دیگر عوامل مانند تغییرات محیط، و همچنین تغییر بارگذاری که در بخش ۴-۲-۴ بررسی شد محسوس نمی‌باشد و عوامل دیگر تأثیرگذاری بیشتری را نشان می‌دهند.

۴-۷- مدل‌سازی ترک‌خوردگی بین دانه‌ای

یک گام مهم در راستای شناخت بیشتر پدیده IGSCC بررسی پیش‌روی ترک در راستای مرز بین دانه‌ها می‌باشد. همان طور که پیش‌تر بیان شد، مرزهای بین دانه‌ای مسیرهای ترجیحی برای اکسیداسیون و پیش‌روی ترک می‌باشند. انرژی شکست مرزهای بین دانه‌ای نیز بسیار پایین تر از حجم ماده می‌باشد و بر اساس جهت گیری کریستالی دانه‌های مجاور می‌تواند متفاوت باشد. بر همین اساس در این پژوهش سعی بر بررسی تأثیر مقدار انرژی شکست مرز بین دانه‌ای در نرخ پیش‌روی ترک شده است. بر اساس مسئله بررسی شده و مسیر پیش‌روی ترک بدست آمده در پژوهش آوٹ و همکاران^۱ [۱۲۶]، شکل ۴-۳۴، مسیر پیش‌روی ترک بین دانه‌ای به مانند شکل ۴-۳۵ انتخاب شده است و به مانند پژوهش آوٹ و همکاران تحت بار کششی گسترده قرار می‌گیرد.



شکل ۴-۳۴- مسئله مورد بررسی در پژوهش آوٹ و همکاران برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای [۱۲۶].

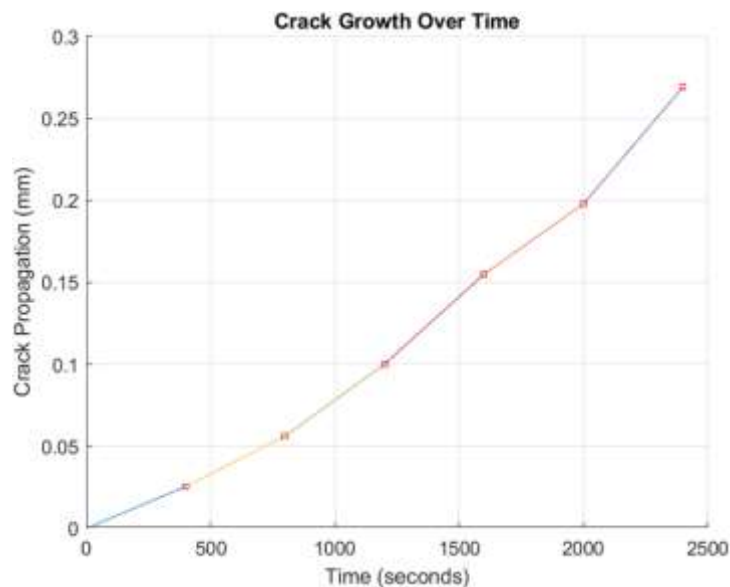


شکل ۴-۳۵- نمای کلی و المان بندی مسئله مورد بررسی برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای.

در شکل ۴-۳۵ ابعاد صفحه به اندازه ۵۵۰ میکرومتر می‌باشد. برای صفحه مربعی تحت کشش گسترده ضریب شدت تنش به صورت رابطه ۴-۴ تعریف می‌شود.

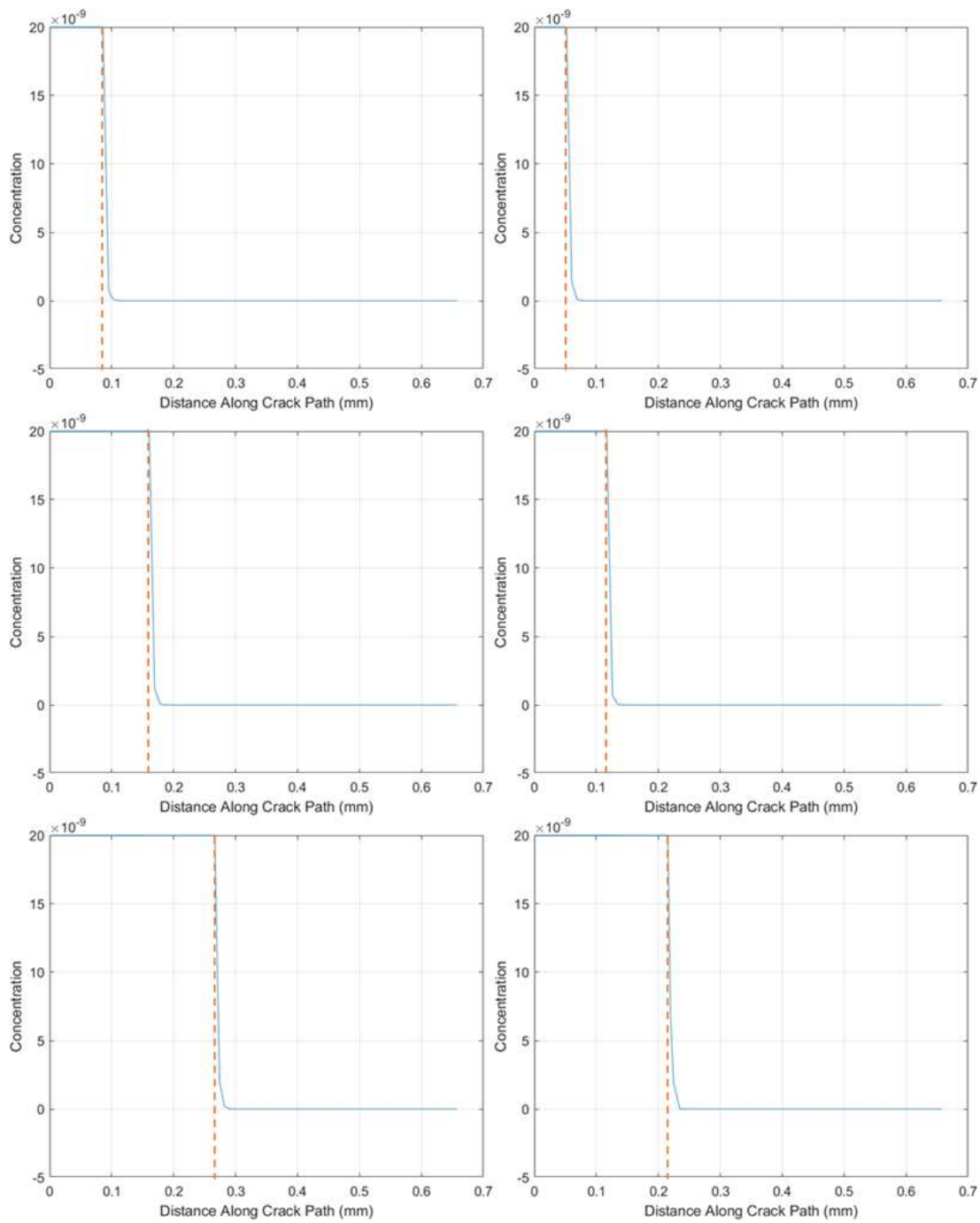
$$k = \sqrt{\pi a} \times \left(1.122 - 0.231 \frac{a}{w} + 10.55 \left(\frac{a}{w} \right)^2 - 21.71 \left(\frac{a}{w} \right)^3 + 30.382 \left(\frac{a}{w} \right)^4 \right) \times t^* \quad (4-4)$$

در رابطه بالا a طول ترک اولیه، w عرض صفحه و t^* تنش کششی اعمال شده بر صفحه به مانند شکل ۴-۳۴ می‌باشد. در این پژوهش بر اساس پژوهش آوٹ و همکاران بارگذاری متناظر با ضریب شدت تنش $200 \text{ MPa}\sqrt{\text{mm}}$ انتخاب شده است. با توجه به اینکه پارامترهای مکانیکی مرز بین دانه‌ای مشابه با پارامترهای حجم ماده نمی‌باشد، نیاز به کالیبراسیون مجدد پارامترهای ورودی می‌باشد. با بهره‌گیری از مقادیر بیان شده برای انرژی شکست، کشش ماکسیمم و ضریب انتشاریابی توسط آوٹ و همکاران، و در نظر گرفتن مقدار اکسیژن محلول به مانند تست‌های انجام شده در این پژوهش می‌توان پارامترهای ورودی مدل را برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای کالیبره کرد. با در نظر گرفتن انرژی شکست، Φ_n ، برابر با $8,155 \text{ N/mm}$ و حداکثر کشش قابل تحمل عمودی و مماسی، $T_{\max}$ ، برابر با 2000 MPa و ضریب انتشاریابی جامد، D_s ، برابر با $4,5 \times 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$ و با قرار دادن مقدار اکسیژن محلول محیط به اندازه 20 ppb ، نرخ رشد ترک گزارش شده در پژوهش آوٹ و همکاران حدود $1 \times 10^{-4} \text{ mm/s}$ بوده است. با در نظر گرفتن مقادیر نام‌برده شده برای پارامترهای مربوطه و مقدار یون خورنده محیطی مشابه، و کالیبره کردن دیگر پارامترها، نمودار پیش‌روی ترک در طول زمان برای ترک‌خوردگی بین دانه‌ای به صورت شکل ۴-۳۶ بدست می‌آید. در این بررسی پارامترهای غلظت مشخصه، C_{char} ، و پارامترهای تخریب، d_8 و d_{02} ، به ترتیب به مقدار $0,99$ ، $0,0001$ و $0,9$ قرار داده شده‌اند. متوسط نرخ رشد ترک در شکل ۴-۳۶ به اندازه $1,12 \times 10^{-4} \text{ mm/s}$ می‌باشد. گام زمانی در این مدل‌سازی‌ها به اندازه 400 ثانیه می‌باشد.



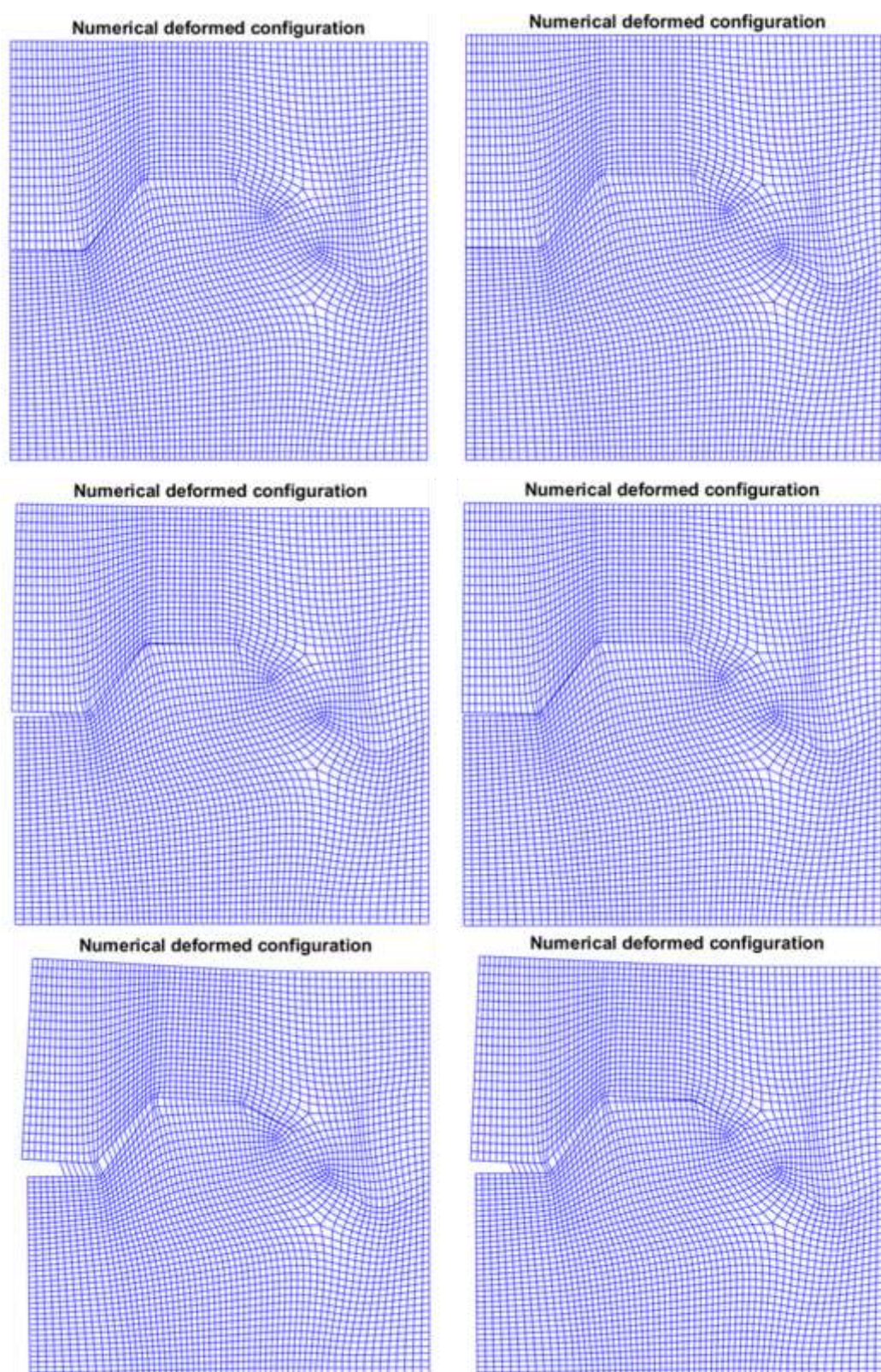
شکل ۴-۳۶- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان.

نمودارهای غلظت در راستای مرز بین دانه‌ای برای رشد ترک‌های متفاوت در شکل ۴-۳۷ نشان داده شده است.



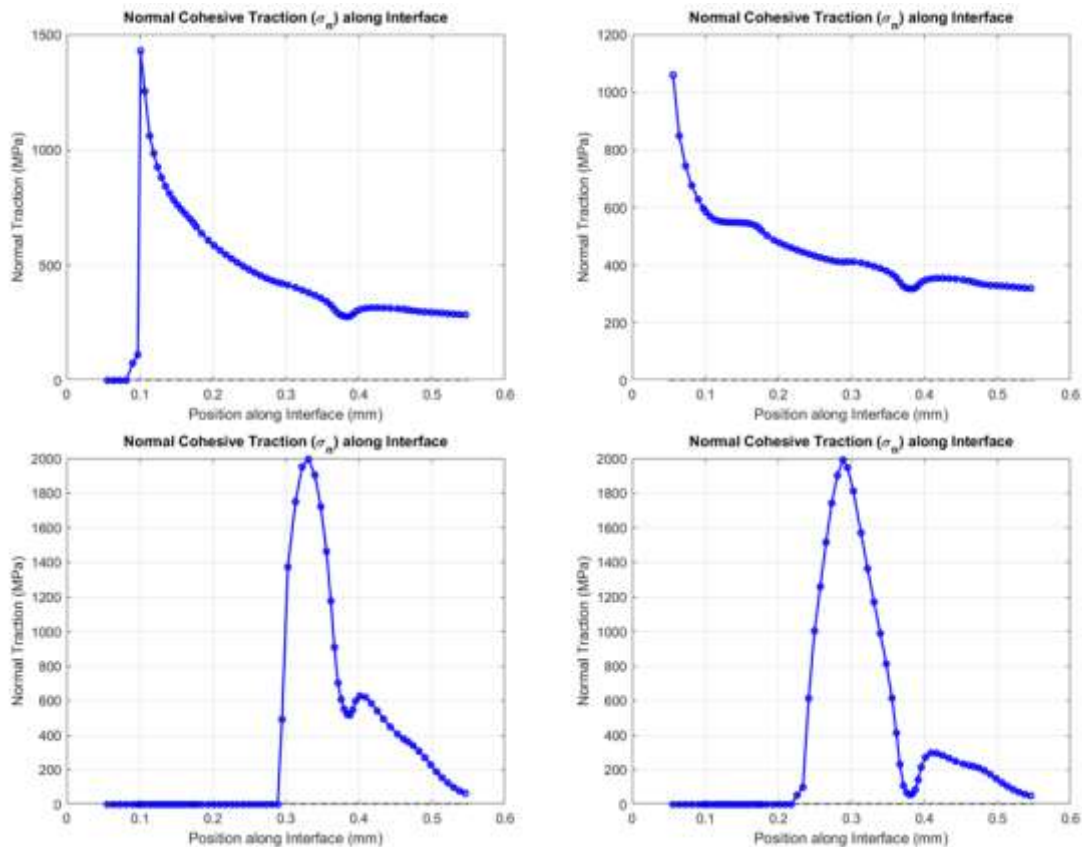
شکل ۴-۳۷- مقادیر غلظت در راستای مرز بین دانه‌ای برای رشد ترک‌ها متفاوت. خط چین عمودی بیانگر محل نوک ترک می‌باشد.

نمای تغییر شکل یافته در نوک ترک‌های متفاوت در شکل ۴-۳۸ نشان داده شده است.



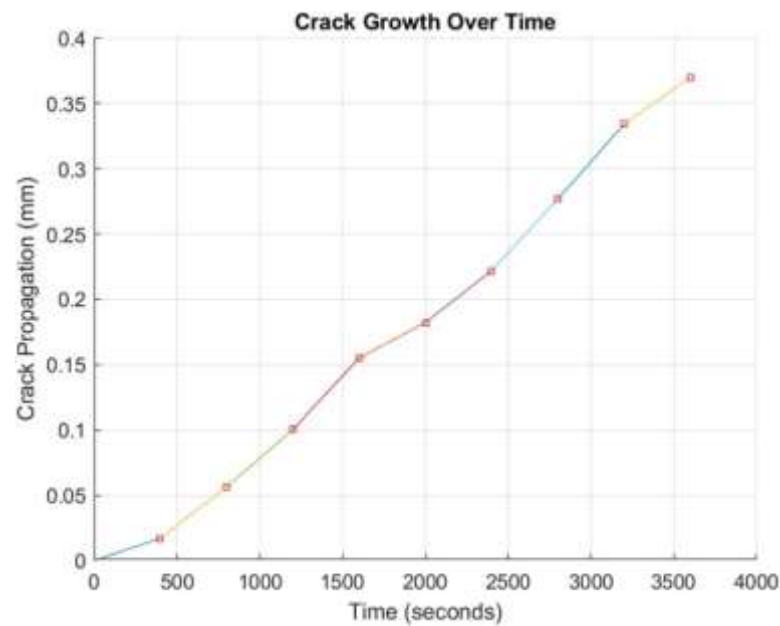
شکل ۴-۳۸- نمای تغییر شکل یافته در هنگام پیشروی ترک بین دانه‌ای.

همچنین نمودارهای کشش نرمال در المان‌های چسبنده در مرز بین دانه‌ای در طول قبل از شروع پیش‌روی ترک و در طول ترک‌های متفاوت در شکل ۴-۳۹ نشان داده شده است.

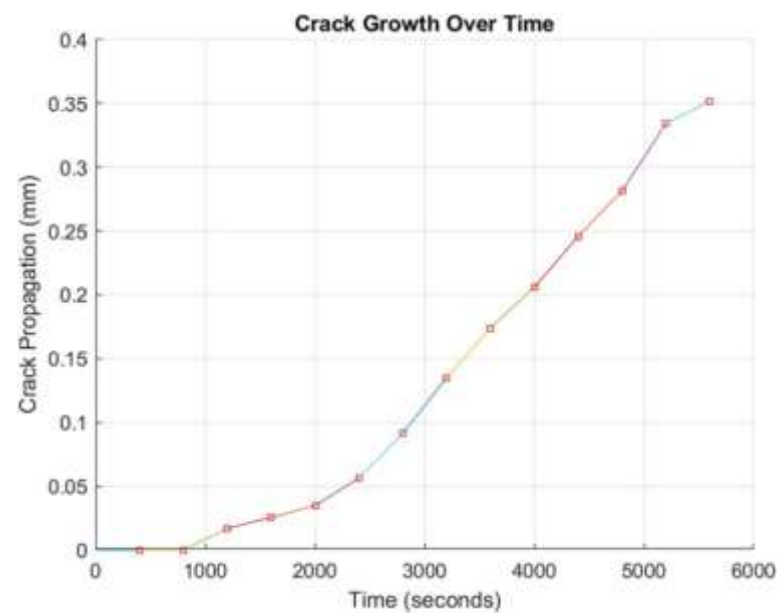


شکل ۴-۳۹- کشش عمودی المان‌های چسبنده در راستای مرز بین دانه‌ای در طول ترک‌های متفاوت.

پس از کالیبره کردن پارامترها با افزایش انرژی شکست مرز بین دانه‌ای و ثابت نگه داشتن کشش بیشنیه، تاثیر افزایش انرژی شکست در نرخ رشد ترک بین دانه‌ای بررسی می‌شود. با ثابت نگه داشتن بار و شرایط محیطی، با افزایش انرژی شکست به اندازه یک و نیم برابر و دو برابر انرژی شکست استفاده شده، به ترتیب شکل‌های ۴-۴۰ و ۴-۴۱ برای نرخ رشد ترک بین دانه‌ای بدست می‌آیند.



شکل ۴-۴۰- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان با یک و نیم برابر کردن انرژی شکست بین دانه‌ای.



شکل ۴-۴۱- پیش‌روی ترک بین دانه‌ای در طول زمان با دو برابر کردن انرژی شکست بین دانه‌ای.

متوسط نرخ رشد ترک در شکل ۴-۴۰ به اندازه 1.03×10^{-4} mm/s می‌باشد و در شکل ۴-۴۱ به اندازه 7.3×10^{-5} mm/s می‌باشد. همان طور که دیده می‌شود می‌توان گفت که افزایش انرژی شکست با کاهش نرخ رشد ترک رابطه به نسبت مستقیمی دارد.

۴-۸- بحث و تحلیل نتایج

بخش‌های قبلی کالیراسیون موفقیت‌آمیز و مهم‌تر از آن، اعتبارسنجی مدل شیمیایی-مکانیکی گذرای کاملاً کوپل شده برای ترک‌خوردگی تنشی بین دانه‌ای (IGSCC) را نشان داده‌اند. هدف این بحث، تشریح این نتایج، تفسیر نقش حلقه بازخورد شیمیایی-مکانیکی، اهمیت فیزیکی پارامترهای مدل کالیبره شده و پیامدهای گسترده‌تر قابلیت‌های پیش‌بینی‌کننده مدل است.

۴-۸-۱- تعامل حلقه بازخورد شیمیایی-مکانیکی

موفقیت مطالعات اعتبارسنجی مستقیماً از توانایی مدل در ثبت برهمکنش هم‌افزایی بین میدان‌های مکانیکی و شیمیایی در نوک ترک ناشی می‌شود. این حلقه بازخورد را می‌توان به دو مسیر مجزا اما در هم تنیده تجزیه کرد که هر دو توسط نتایج شبیه‌سازی روشن شده‌اند.

اول، تأثیر میدان مکانیکی بر میدان شیمیایی -انتشار به کمک تنش- به طور قدرتمندی توسط توانایی مدل در پیش‌بینی تأثیر ضریب شدت تنش (k) بر نرخ رشد ترک (CGR) نشان داده شده است، همانطور که در بخش ۴-۴-۲ نشان داده شده است. افزایش ضریب k اعمال شده منجر به افزایش شدت تنش و گرادینان تنش تندتر در نوک ترک می‌شود. همانطور که در معادله (۳-۷) فرموله شده است، این شیب کشش عمودی به عنوان یک نیروی محرکه اضافی برای شار گونه‌های خورنده عمل می‌کند و انتقال آنها را در امتداد مرز دانه قبل از ترک پیشرونده تسریع می‌کند. این غنی‌سازی موضعی مواد خورنده در منطقه فرآیند به این معنی است که غلظت بحرانی مورد نیاز برای تخریب مواد سریع‌تر حاصل می‌شود و مستقیماً منجر به CGR بالاتر می‌شود. توافق عالی بین CGR های پیش‌بینی شده و تجربی در طیف وسیعی از مقادیر k ، شکل ۴-۲۰، تأیید می‌کند که مدل به طور مؤثر این مکانیسم حیاتی را که در آن حالت مکانیکی به طور فعال محیط شیمیایی موضعی نوک ترک را تعیین می‌کند، به تصویر کشیده است.

دوم، تأثیر متقابل میدان شیمیایی بر میدان مکانیکی -شکستگی وابسته به غلظت- با پیش‌بینی دقیق CGR تحت شیمی محیطی تغییر یافته (بخش ۴-۴-۱) تأیید می‌شود. مدل به درستی پیش‌بینی کرد که کاهش ده برابری در غلظت اکسیژن محلول (از ۲۰۰۰ ppb به ۲۰۰ ppb در محیط BWR) منجر به CGR تقریباً یکسانی هنگام افزایش جزئی بار مکانیکی می‌شود. دلیل این امر، تخریب ناحیه چسبنده بر اساس غلظت خوردگی موضعی است. تجمع گونه‌های خورنده در مرز دانه مستقیماً استحکام چسبندگی ماده (Φ_n) و پارامترهای جداسازی مشخصه (δ_n ، δ_t) را کاهش می‌دهد و به طور مؤثر سطح مشترک را شکننده می‌کند. غلظت محیطی پایین‌تر منجر به سرعت تجمع کمتر در نوک ترک می‌شود،

در نتیجه سرعت شکنندگی و در نتیجه CGR را کاهش می‌دهد. توانایی مدل در ثبت این وابستگی نشان می‌دهد که به درستی شبیه‌سازی می‌کند که چگونه محیط شیمیایی مقاومت ذاتی ماده در برابر شکست را تعیین می‌کند.

۴-۸-۲- تفسیر فیزیکی پارامترهای کالیبره شده

فرآیند کالیبراسیون، که در بخش ۳-۴ به تفصیل شرح داده شده است، مجموعه پارامترهای متمایزی را برای هر یک از چهار سیستم ماده-محیط ارائه داد (جدول ۴-۲). این پارامترها را نباید صرفاً به عنوان ثابت‌های برازش منحنی در نظر گرفت، بلکه باید به عنوان بازنمایی‌های کمی از پدیده‌های فیزیکی اساسی که این سیستم‌ها را متمایز می‌کنند، در نظر گرفت.

- **ضریب نفوذ جامد (D_s):** این پارامتر نشان‌دهنده‌ی تحرک گونه‌های خورنده در امتداد مرز دانه‌ها است. نکته‌ی قابل توجه این است که D_s کالیبره شده برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در محیط PWR بیش از دو برابر سایر سیستم‌ها است. این نشان‌دهنده‌ی تحرک ذاتی بالاتر گونه‌های مخرب در این ترکیب خاص است. این ضریب نفوذ بالاتر، همراه با غلظت مشخصه بسیار پایین، به مدل اجازه می‌دهد تا CGR بالای مشاهده شده تجربی برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ دارای نورد سرد در آب PWR را بازتولید کند، حتی اگر غلظت اکسیژن محیطی بسیار پایین باشد. این ممکن است نشان‌دهنده‌ی نقش پیچیده‌ی هیدروژن و سایر گونه‌ها در محیط PWR باشد که انتقال در امتداد مرز دانه‌ها را تسهیل می‌کند.
- **غلظت مشخصه (C_{char}):** این پارامتر نشان‌دهنده حساسیت ماده به شکنندگی است. C_{char} پایین‌تر نشان می‌دهد که برای ایجاد تخریب قابل توجه، غلظت موضعی کمتری از یون خورنده مورد نیاز است. مقدار کالیبره شده برای آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ نورد سرد شده در آب PWR چندین برابر کمتر از فولاد ضد زنگ نورد سرد شده در همان محیط است. این مقدار به صورت کمی، حساسیت بالای آلیاژ پایه نیکل به IGSCC در PWRها را که به خوبی مستند شده است، نشان می‌دهد و نشان می‌دهد که این آلیاژ حتی به مقادیر ناچیز خورنده در نوک ترک نیز بسیار حساس است. برعکس، C_{char} بالاتر برای فولاد ضد زنگ، تحمل بیشتری را قبل از وقوع تخریب قابل توجه خواص چسبندگی آن نشان می‌دهد.
- **پارامترهای تخریب (d_0 ، d_8):** این پارامترها که به طور مداوم با مقادیر بالا (۰٫۹ تا ۰٫۹۹۹) کالیبره می‌شوند، شدت تخریب را کمی می‌کنند. آن‌ها نشان می‌دهند که پس از رسیدن به غلظت مشخصه، انرژی چسبندگی و شکل‌پذیری مرز دانه بیش از ۹۰٪ کاهش می‌یابد. این

کاملاً با واقعیت فیزیکی IGSCC مطابقت دارد، جایی که حالت شکست از پارگی شکل‌پذیر توده ماده به یک شکستگی شکننده و کم‌انرژی در امتداد مسیر بین دانه‌ای منتقل می‌شود.

۴-۸-۳- اهمیت اعتبارسنجی پیش‌بینی کننده

قدرت واقعی هر مدل مبتنی بر فیزیک نه در توانایی آن در برازش داده‌ها، بلکه در قدرت آن در پیش‌بینی رفتار تحت شرایط جدید نهفته است. مطالعات اعتبارسنجی در بخش ۴-۴ تأیید می‌کند که مدل توسعه‌یافته فراتر از توصیف صرف است. با پیش‌بینی دقیق وابستگی CGR به نیروی محرکه مکانیکی (k) و محیط شیمیایی خارجی (اکسیژن محلول)، این مدل نشان می‌دهد که با موفقیت فیزیک بنیادی فرآیند IGSCC همبسته را در بر گرفته است. این قابلیت برای کاربردهای مهندسی بسیار مهم است، زیرا امکان ارزیابی یکپارچگی اجزا را تحت سناریوهای عملیاتی مختلف که ممکن است با شرایطی که داده‌های تجربی محدودی برای آن وجود دارد متفاوت باشد، فراهم می‌کند.

به طور خلاصه، نتایج ارائه شده در این فصل، مدل گذرای کاملاً همبسته را به عنوان ابزاری قوی و مبتنی بر فیزیک برای تجزیه و تحلیل IGSCC تأیید می‌کند. شبیه‌سازی‌ها تأیید می‌کنند که بازخورد دینامیکی بین انتشار به کمک تنش و شکنندگی ناشی از غلظت، موتور اصلی محرک انتشار ترک است. با کمی‌سازی این تعامل، این مدل بینش‌های مهمی در مورد رفتارهای متمایز سیستم‌های مختلف مواد-محیط ارائه می‌دهد و پایه‌ای قابل اعتماد برای ارزیابی پیش‌بینی‌کننده یکپارچگی سازه ایجاد می‌کند.

فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۵-۱- مقدمه

این پایان‌نامه برای پرداختن به یک چالش اساسی در علم مواد و یکپارچگی سازه‌ها آغاز شد: مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده ترک‌خوردگی تنش-خوردگی بین‌دانه‌ای (IGSCC). این پدیده که ناشی از تعامل پیچیده و هم‌افزایی بین تنش مکانیکی و خوردگی محیطی است، به دلیل محدودیت‌های مدل‌های غیر همبسته یا همبسته یک‌طرفه، از نظر تاریخی شبیه‌سازی آن دشوار بوده است. هدف اصلی این تحقیق، توسعه، پیاده‌سازی و اعتبارسنجی یک مدل المان محدود شیمیایی-مکانیکی گذرا و کاملاً همبسته شده بود که قادر به ثبت فیزیک اساسی IGSCC و پیش‌بینی نرخ رشد ترک وابسته به زمان باشد. این فصل پایانی، دستاوردهای اصلی این کار را خلاصه می‌کند و مسیرهای امیدوارکننده‌ای را برای تحقیقات آینده که می‌توانند بر اساس چارچوب ایجاد شده بنا شوند، ترسیم می‌کند.

۵-۲- خلاصه و نتیجه‌گیری

این تحقیق منجر به توسعه موفقیت‌آمیز یک ابزار عددی مناسب برای تحلیل IGSCC شده است. دستاوردها و نتایج کلیدی حاصل از این کار به شرح زیر خلاصه شده است:

۱. توسعه فرمولاسیون کاملاً همبسته: یک چارچوب جامع ریاضی و عددی برای شبیه‌سازی IGSCC تدوین شد. این مدل دو فرآیند فیزیکی حیاتی را در یک سیستم واحد و منسجم ادغام می‌کند:

- شکستگی مکانیکی: جداسازی تدریجی و شکست مرزدانه‌ها با استفاده از مدل ناحیه چسبنده ژو-نیدلمن مدل‌سازی شد، که امکان کاهش انرژی شکست و مقاومت چسبندگی و کاهش شکل‌پذیری را به عنوان تابعی از غلظت یون‌های خوردنده موضعی فراهم می‌کند.
- انتشار شیمیایی: انتقال گونه‌های خوردنده در امتداد مرز دانه با استفاده از قانون فیک مدل‌سازی شد، که به طور اساسی اصلاح شده بود تا شامل یک عبارت انتشار به کمک تنش باشد. این عبارت، شار خوردگی‌ها را مستقیماً به گرادیان کشش عمودی مکانیکی در نوک ترک مرتبط می‌کند.

۲. پیاده‌سازی محاسبه گر المان محدود گذرا: معادلات حاکم غیرخطی همبسته در یک کد المان محدود گذرا که در MATLAB نوشته شده است، پیاده‌سازی شدند. یک طرح انتگرال‌گیری زمانی اوایلر عقب‌گرد همراه با یک محاسبه گر تکرار نیوتن-رافسون، یک راه‌حل پایدار و دقیق را تضمین می‌کند و شبیه‌سازی مستقیم پیش‌روی ترک در طول زمان و محاسبه نرخ رشد ترک (CGR) را امکان‌پذیر می‌سازد.

۳. تأیید قابلیت پیش‌بینی مدل به طور دقیق: عملکرد مدل از طریق یک فرآیند چند مرحله‌ای ارزیابی شد. پس از تأیید جداگانه عملکرد مکانیکی و انتشار مدل، در برابر معیارهای تحلیلی و مراجع آزمایشگاهی، مدل با استفاده از داده‌های تجربی CGR برای چهار ترکیب ماده-محیط صنعتی کلیدی کالیبره شد: آلیاژ پایه نیکل ۶۰۰ نورد سرد و فولاد ضد زنگ نورد سرد شده در دو محیط BWR و PWR. پارامترهای کالیبره شده، مانند ضریب نفوذ جامد (D_s) و غلظت مشخصه (C_{char})، بینش فیزیکی کمی در مورد حساسیت‌های مختلف IGSCC این سیستم‌ها ارائه دادند. مهمتر از همه، این مدل قابلیت پیش‌بینی مناسبی را نشان داد. با استفاده از پارامترهای کالیبره شده، CGR ها را تحت بارهای مکانیکی مختلف (ضرایب شدت تنش متغیر) و شرایط محیطی تغییر یافته (غلظت‌های اکسیژن محلول متغیر) به طور به نسبت دقیق پیش‌بینی کرد و تطابق قوی با داده‌های تجربی مستقل نشان داد.

۴. تأیید اهمیت حلقه بازخورد شیمیایی-مکانیکی: نتایج اعتبارسنجی، فرضیه اصلی این پایان‌نامه را به طور واضح تأیید می‌کند. حلقه بازخورد هم‌افزایی -که در آن تنش مکانیکی، ورود مواد شیمیایی را تسریع می‌کند و تخریب شیمیایی حاصل، ماده را تضعیف کرده و شکست مکانیکی را تسهیل می‌کند- عامل اصلی محرک IGSCC است. با مدل‌سازی صریح این اتصال دو طرفه، این تحقیق با موفقیت فیزیک اساسی را به تصویر کشید.

در نتیجه، این تحقیق یک مدل مناسب مبتنی بر فیزیک از نظر محاسباتی، و از نظر تجربی معتبر برای IGSCC ارائه داده است. این تحقیق نشان داد که یک رویکرد کاملاً همبسته و گذرا صرفاً یک بهبود نیست، بلکه یک ضرورت برای پیش‌بینی دقیق ترک خوردگی ناشی از عوامل محیطی است. چارچوب توسعه‌یافته به عنوان ابزاری قدرتمند برای افزایش درک اساسی از تخریب مواد عمل می‌کند و روشی قابل اعتمادتر برای ارزیابی طول عمر و مدیریت یکپارچگی ساختاری اجزای مهندسی حیاتی که در محیط‌های خورنده کار می‌کنند، ارائه می‌دهد.

۵-۳- پیشنهادات تحقیقات آتی

چارچوب ارائه شده در این پایان‌نامه، اگرچه جامعیت نسبی را دارا است، اما به عنوان بستری اساسی برای پیشرفت‌های بالقوه متعدد و مسیرهای جدید تحقیقاتی نیز عمل می‌کند. حوزه‌های زیر به عنوان مسیرهای امیدوارکننده برای کارهای آینده شناسایی شده‌اند:

۱. مدل‌سازی پلاستیسیته کریستالی در سنگدانه‌های پلی کریستالی: فرض مدل فعلی مبنی بر رفتار حجمی الاستیک خطی و یک مسیر ترک از پیش تعریف شده و واحد می‌تواند به طور قابل توجهی پیشرفت کند. یک جهت‌گیری بسیار تأثیرگذار در آینده، شبیه‌سازی یک سنگدانه پلی کریستال کامل با جایگزینی عناصر حجمی الاستیک با یک مدل المان محدود پلاستیسیته کریستالی^۱ (CPFEM) و نمایش تمام مرزهای دانه با عناصر چسبده شیمیایی-مکانیکی توسعه‌یافته خواهد بود. یک CPFEM پاسخ الاستیک-پلاستیک ناهمسانگرد دانه‌های منفرد را بر اساس جهت‌گیری کریستالوگرافی آنها و فعال شدن سیستم‌های لغزشی ثبت می‌کند. این امر به مدل اجازه می‌دهد تا به طور واقع‌بینانه‌ای توسعه ناهمگنی تنش و کرنش را در سراسر ریزساختار شبیه‌سازی کند، که برای IGSCC بسیار مهم است. با

1 Crystal Plasticity Finite Element Model (CPFEM)

مدل‌سازی کل شبکه دانه، شبیه‌سازی دیگر به یک مسیر از پیش تعریف شده محدود نمی‌شود، بلکه می‌تواند شروع ترک را در آسیب‌پذیرترین مکان‌ها (به عنوان مثال، مرزهای دانه که به دلیل ناسازگاری لغزش با دانه‌های همسایه، غلظت‌های بالای تنش را تجربه می‌کنند) پیش‌بینی کند و تکامل مسیرهای ترک پیچیده و پرپیچ و خم، از جمله شاخه‌دار شدن و به هم پیوستن را شبیه‌سازی کند. این رویکرد، یک ارتباط مستقیم و مبتنی بر فیزیک بین رفتار میکروسکوپی مواد و شکست اجزای ماکروسکوپی فراهم می‌کند.

۲. در نظر گرفتن اثرات ریزساختاری موضعی به خصوص کاهش کروم: حساسیت IGSCC

اغلب توسط تغییرات شیمیایی موضعی در سطح ریزساختاری تعیین می‌شود. یک مثال کلیدی، حساس شدن فولادهای ضد زنگ است که منجر به کاهش کروم (Cr) در نواحی مجاور کاربیدهای مرز دانه می‌شود. این پدیده را می‌توان با متغیر کردن پارامترهای ناحیه چسبنده از نظر مکانی در مدل ادغام کرد. غلظت مشخصه (C_{char}) و انرژی شکست (Φ_n) را می‌توان به عنوان توابعی از موقعیت در امتداد شبکه مرز دانه تعریف کرد، و مقادیر اولیه آنها بر اساس خروجی شبیه‌سازی‌های ترموسینتیکی که پروفیل غلظت Cr ناشی از یک تاریخچه حرارتی خاص، مانند جوشکاری را پیش‌بینی می‌کنند، نگاشت می‌شوند. این امر مدل را قادر می‌سازد تا به صراحت آسیب‌پذیری افزایش یافته مناطق تحت تأثیر گرما را شبیه‌سازی کند.

۳. مدل‌سازی تأثیر ناخالصی‌های محیطی: شیمی محیط‌های LWR پیچیده است و اثرات

هم‌افزایی گونه‌های یونی مختلف و گازهای محلول بسیار مهم است. این مدل می‌تواند برای در نظر گرفتن تأثیر ناخالصی‌های کلیدی موجود در محیط‌های PWR، مانند یون‌های لیتیوم (Li^+)، سولفید و کلرید و همچنین هیدروژن محلول، گسترش یابد. این امر مستلزم یک فرمول‌بندی انتشار چند گونه‌ای است که در آن انتقال هر گونه ردیابی می‌شود. علاوه بر این، قانون تخریب ناحیه چسبنده باید به گونه‌ای بهبود یابد که به غلظت همه یون‌های خورنده وابسته باشد. به عنوان مثال، می‌توان حضور کلرید یا سولفید را به گونه‌ای مدل‌سازی کرد که غلظت مشخصه مورد نیاز برای تخریب ناشی از اکسیژن یا هیدروژن را به صورت کاتالیزوری کاهش دهد. مدل‌سازی هیدروژن محلول همچنین امکان شبیه‌سازی صریح مکانیسم تردی هیدروژنی موازی یا هم‌افزایی (HE) را فراهم می‌کند که یکی از عوامل کلیدی IGSCC در بسیاری از سیستم‌ها است.

۴. **گسترش به تحلیل سه‌بعدی:** کار حاضر در فضای دوبعدی و با فرض کرنش صفحه‌ای انجام شده است. گسترش مدل به فضای سه‌بعدی، گامی بزرگ در جهت شبیه‌سازی رفتار ترک در دنیای واقعی خواهد بود. یک مدل سه‌بعدی امکان بررسی اشکال پیچیده جبهه ترک، تغییرات تنش و غلظت در سراسر ضخامت و برهمکنش جبهه ترک با ریزساختار سه‌بعدی ماده را فراهم می‌کند.

۵. **ادغام مستقیم با داده‌های ریزساختار تجربی:** یک کاربرد قدرتمند در آینده شامل ادغام مستقیم مدل المان محدود با داده‌های ریزساختار تجربی به‌دست‌آمده از تکنیک‌هایی مانند پراش الکترون‌های برگشتی^۱ (EBSD) خواهد بود. این امر امکان ایجاد مدل‌های "دوقلوی دیجیتال" با دقت بالا از نمونه‌های واقعی مواد را فراهم می‌کند و امکان مقایسه مستقیم و یک‌به‌یک بین پیش‌بینی‌های شبیه‌سازی و مشاهدات تجربی مسیرها و نرخ‌های ترک را فراهم می‌کند.

دنبال کردن این مسیرهای تحقیقاتی، صحت و کاربرد رویکرد مدل‌سازی شیمیایی-مکانیکی را بیشتر افزایش می‌دهد و بر پایه‌ی اعتبارسنجی‌شده‌ای که در این پایان‌نامه ایجاد شده است، ابزارهای قدرتمندتری را برای تضمین ایمنی و قابلیت اطمینان سازه‌های مهندسی حیاتی ایجاد می‌کند.

1 Electron backscatter diffraction (EBSD)

منابع و مراجع

- [1] M. B. Anoop, K. Balaji Rao, and N. Lakshmanan, "Safety assessment of austenitic steel nuclear power plant pipelines against stress corrosion cracking in the presence of hybrid uncertainties," *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, Article vol. 85, no. 4, pp. 238-247, 2008, doi: 10.1016/j.ijpvp.2007.09.001.
- [2] V. S. Raja and T. Shoji, *Stress corrosion cracking: Theory and practice* (Stress corrosion cracking: Theory and practice). 2011, pp. 1-792.
- [3] S. J. Suess, "Case histories involving stress corrosion cracking of various alloys," *Corrosion*, Article vol. 64, no. 5, pp. 401-419, 2008, doi: 10.5006/1.3278481.
- [4] C. A. Loto, "Stress corrosion cracking: characteristics, mechanisms and experimental study," *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Article vol. 93, no. 9-12, pp. 3567-3582, 2017, doi: 10.1007/s00170-017-0709-z.
- [5] P. Andresen, "Stress corrosion cracking (SCC) of austenitic stainless steels in high temperature light water reactor (LWR) environments," in *Understanding and Mitigating Ageing in Nuclear Power Plants*: Elsevier, 2010, pp. 236-307.
- [6] K. L. Auth, J. Brouzoulis, and M. Ekh, "A fully coupled chemo-mechanical cohesive zone model for oxygen embrittlement of nickel-based superalloys," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 164, p. 104880, 2022/07/01/ 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2022.104880>.

- [7] T. Terachi, T. Yamada, T. Miyamoto, and K. Arioka, "SCC growth behaviors of austenitic stainless steels in simulated PWR primary water," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 426, no. 1, pp. 59-70, 2012/07/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.03.013>.
- [8] S. C. Bali, V. S. Raja, and V. Kain, "Effect of low temperature sensitization on IGSCC behaviour of type 304L and type 304LN SS in oxygenated high temperature water," in *17th International Corrosion Congress 2008: Corrosion Control in the Service of Society*, 2008, vol. 2, pp. 1091-1103. [Online]. Available: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84865021070&partnerID=40&md5=086e88acbc10a310cb5cd9fff9faf49e>. [Online]. Available: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84865021070&partnerID=40&md5=086e88acbc10a310cb5cd9fff9faf49e>
- [9] Z. Shen *et al.*, "Microstructural understanding of the oxidation of an austenitic stainless steel in high-temperature steam through advanced characterization," *Acta Materialia*, vol. 194, pp. 321-336, 2020/08/01/ 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.05.010>.
- [10] H. L. Logan, "Film-rupture mechanism of stress corrosion," *J RES NATL BUREAU STDS*, vol. 48, no. 2, pp. 99-105, 1952.
- [11] T. Nakayama and M. Takano, "Application of a slip dissolution-repassivation model for stress corrosion cracking of AISI 304 stainless steel in a boiling 42% MgCl₂ solution," *Corrosion*, vol. 42, no. 1, pp. 10-15, 1986.
- [12] F. Ford, "Quantitative examination of slip-dissolution and hydrogen-embrittlement theories of cracking in aluminium alloys," *Metal Science*, vol. 12, no. 7, pp. 326-334, 1978.
- [13] X. Liu *et al.*, "Toward the multiscale nature of stress corrosion cracking," *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 50, no. 1, pp. 1-17, 2018.
- [14] C. Pu, Y. Gao, Y. Wang, and T.-L. Sham, "Diffusion-coupled cohesive interface simulations of stress corrosion intergranular cracking in polycrystalline materials," *Acta Materialia*, vol. 136, pp. 21-31, 2017.
- [15] M. Sedlak, B. Alfredsson, and P. Efsing, "A coupled diffusion and cohesive zone model for intergranular stress corrosion cracking in 316L stainless steel exposed to cold work in primary water conditions," *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 217, p. 106543, 2019.
- [16] L. Jemblie, V. Olden, and O. M. Akselsen, "A coupled diffusion and cohesive zone modelling approach for numerically assessing hydrogen embrittlement of steel structures," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 16, pp. 11980-11995, 2017.

- [17] P. K. Kristensen, C. F. Niordson, and E. Martinez-Paneda, "A phase field model for elastic-gradient-plastic solids undergoing hydrogen embrittlement," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 143, p. 104093, 2020.
- [18] I. Scheider, M. Pfuff, and W. Dietzel, "Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model," *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 75, no. 15, pp. 4283-4291, 2008.
- [19] S. del Busto, C. Betegón, and E. Martínez-Pañeda, "A cohesive zone framework for environmentally assisted fatigue," *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 185, pp. 210-226, 2017.
- [20] Y. Sun, K. Maciejewski, and H. Ghonem, "A damage-based cohesive zone model of intergranular crack growth in a nickel-based superalloy," *International Journal of Damage Mechanics*, vol. 22, no. 6, pp. 905-923, 2013.
- [21] I. Simonovski and L. Cizelj, "Towards modeling intergranular stress corrosion cracks on grain size scales," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 246, pp. 107-114, 2012.
- [22] A. Jivkov, N. Stevens, and T. J. Marrow, "A two-dimensional mesoscale model for intergranular stress corrosion crack propagation," *Acta materialia*, vol. 54, no. 13, pp. 3493-3501, 2006.
- [23] K. Zhao, S. Wang, H. Xue, and Z. Wang, "Effect of Material Heterogeneity on Environmentally Assisted Cracking Growth Rate of Alloy 600 for Safe-End Welded Joints," *Materials*, vol. 14, no. 20, p. 6186, 2021.
- [24] F. Yang, H. Xue, L. Zhao, and X. Fang, "A quantitative prediction model of SCC rate for nuclear structure materials in high temperature water based on crack tip creep strain rate," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 278, pp. 686-692, 2014.
- [25] T.-T. Nguyen, J. Bolivar, J. Réthoré, M.-C. Baietto, and M. Fregonese, "A phase field method for modeling stress corrosion crack propagation in a nickel base alloy," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 112, pp. 65-82, 2017.
- [26] Z. Li, Y. Lu, and X. Wang, "Modeling of stress corrosion cracking growth rates for key structural materials of nuclear power plant," *Journal of materials science*, vol. 55, no. 2, pp. 439-463, 2020.
- [27] M. S. Mosesson, B. Alfredsson, and P. Efsing, "A duplex oxide cohesive zone model to simulate intergranular stress corrosion cracking," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 197, p. 106260, 2021.

- [28] M. Sedlak Mosesson, B. Alfredsson, and P. Efsing, "Simulation of slip-oxidation process by mesh adaptivity in a cohesive zone framework," *Materials*, vol. 14, no. 13, p. 3509, 2021.
- [29] N. Badwe *et al.*, "Decoupling the role of stress and corrosion in the intergranular cracking of noble-metal alloys," *Nature Materials*, Article vol. 17, no. 10, pp. 887-893, 2018, doi: 10.1038/s41563-018-0162-x.
- [30] S. El Shawish and J. Hure, "Intergranular normal stress distributions in untextured polycrystalline aggregates," *European Journal of Mechanics, A/Solids*, Article vol. 72, pp. 354-373, 2018, doi: 10.1016/j.euromechsol.2018.05.011.
- [31] T. Fujii, Y. Takeichi, and Y. Shimamura, "Stochastic model for intergranular stress corrosion cracking of stainless steel," *International Journal of Mechanical Sciences*, Article vol. 286, 2025, Art no. 109888, doi: 10.1016/j.ijmecsci.2024.109888.
- [32] M. A. Arafin and J. A. Szpunar, "A novel microstructure - Grain boundary character based integrated modeling approach of intergranular stress corrosion crack propagation in polycrystalline materials," *Computational Materials Science*, Article vol. 47, no. 4, pp. 890-900, 2010, doi: 10.1016/j.commatsci.2009.11.020.
- [33] A. Siddiq and S. Rahimi, "A multiscale constitutive model for intergranular stress corrosion cracking in type 304 austenitic stainless steel," in *Journal of Physics: Conference Series*, 2013, vol. 451, 1 ed., doi: 10.1088/1742-6596/451/1/012022. [Online]. Available: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84883069619&doi=10.1088%2f1742-6596%2f451%2f1%2f012022&partnerID=40&md5=386d5e1e9959253fce52a2f6c1bd030d>
- [34] H. Fujimori *et al.*, "Stress corrosion cracking in light water reactors: good practices and lessons learned," *International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria, Report No. NP*, 2011.
- [35] V. Trindade, U. Krupp, P. E. G. Wagenhuber, and H. J. Christ, "Oxidation mechanisms of Cr-containing steels and Ni-base alloys at high-temperatures–. Part I: The different role of alloy grain boundaries," *Materials and Corrosion*, vol. 56, no. 11, pp. 785-790, 2005.
- [36] X. Ru *et al.*, "Effects of iron content in NiCrFe alloys on the oxide films formed in an oxygenated simulated PWR water environment," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 509, pp. 29-42, 2018.

- [37] T. Moss and G. S. Was, "Accelerated Stress Corrosion Crack Initiation of Alloys 600 and 690 in Hydrogenated Supercritical Water," *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 48, no. 4, pp. 1613-1628, 2017/04/01 2017, doi: 10.1007/s11661-016-3898-4.
- [38] S. Lozano-Perez, P. Rodrigo, and L. C. Gontard, "Three-dimensional characterization of stress corrosion cracks," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 408, no. 3, pp. 289-295, 2011/01/31/ 2011, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.11.068>.
- [39] H. Dugdale, D. E. J. Armstrong, E. Tarleton, S. G. Roberts, and S. Lozano-Perez, "How oxidized grain boundaries fail," *Acta Materialia*, vol. 61, no. 13, pp. 4707-4713, 2013/08/01/ 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.05.012>.
- [40] D. Raabe *et al.*, "Grain boundary segregation engineering in metallic alloys: A pathway to the design of interfaces," *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, vol. 18, no. 4, pp. 253-261, 2014/08/01/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2014.06.002>.
- [41] R. W. Balluffi, "Grain boundary diffusion mechanisms in metals," *Journal of Electronic Materials*, Article vol. 21, no. 1, pp. 527-553, 1992, doi: 10.1007/BF02669167.
- [42] D. K. Schreiber, M. J. Olszta, and S. M. Bruemmer, "Grain boundary depletion and migration during selective oxidation of Cr in a Ni–5Cr binary alloy exposed to high-temperature hydrogenated water," *Scripta Materialia*, vol. 89, pp. 41-44, 2014/10/15/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.06.022>.
- [43] T. Moss, G. Cao, and G. S. Was, "Oxidation of Alloy 600 and Alloy 690: Experimentally Accelerated Study in Hydrogenated Supercritical Water," *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 48, no. 4, pp. 1596-1612, 2017/04/01 2017, doi: 10.1007/s11661-016-3897-5.
- [44] M. L. Rossi, C. D. Taylor, and A. C. T. van Duin, "Reduced yield stress for zirconium exposed to iodine: reactive force field simulation," *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, vol. 1, no. 1, p. 19, 2014/11/04 2014, doi: 10.1186/s40323-014-0019-z.
- [45] G. Bertali, F. Scenini, and M. Burke, "The intergranular oxidation susceptibility of thermally-treated Alloy 600," *Corrosion Science*, vol. 114, pp. 112-122, 2017.
- [46] T. Terachi, K. Fujii, and K. Arioka, "Microstructural characterization of SCC crack tip and oxide film for SUS 316 stainless steel in simulated PWR primary water at 320 C," *Journal of nuclear science and technology*, vol. 42, no. 2, pp. 225-232, 2005.

- [47] M. Nezakat, H. Akhiani, S. Penttilä, S. M. Sabet, and J. Szpunar, "Effect of thermo-mechanical processing on oxidation of austenitic stainless steel 316L in supercritical water," *Corrosion Science*, vol. 94, pp. 197-206, 2015.
- [48] S. Lozano-Perez, J. Dohr, M. Meisnar, and K. Kruska, "SCC in PWRs: Learning from a Bottom-Up Approach," *Metallurgical and Materials Transactions E*, vol. 1, no. 2, pp. 194-210, 2014/06/01 2014, doi: 10.1007/s40553-014-0020-y.
- [49] X. Zhong, E.-H. Han, and X. Wu, "Corrosion behavior of Alloy 690 in aerated supercritical water," *Corrosion Science*, vol. 66, pp. 369-379, 2013/01/01/ 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2012.10.001>.
- [50] V. Alexandrov, M. L. Sushko, D. K. Schreiber, S. M. Bruemmer, and K. M. Rosso, "Ab Initio Modeling of Bulk and Intragranular Diffusion in Ni Alloys," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 6, no. 9, pp. 1618-1623, 2015/05/07 2015, doi: 10.1021/acs.jpcclett.5b00177.
- [51] B. Stellwag, "The mechanism of oxide film formation on austenitic stainless steels in high temperature water," *Corrosion Science*, vol. 40, no. 2, pp. 337-370, 1998/02/01/ 1998, doi: [https://doi.org/10.1016/S0010-938X\(97\)00140-6](https://doi.org/10.1016/S0010-938X(97)00140-6).
- [52] J. Robertson, "The mechanism of high temperature aqueous corrosion of stainless steels," *Corrosion Science*, vol. 32, no. 4, pp. 443-465, 1991/01/01/ 1991, doi: [https://doi.org/10.1016/0010-938X\(91\)90125-9](https://doi.org/10.1016/0010-938X(91)90125-9).
- [53] W. Kuang, X. Wu, E.-H. Han, and J. Rao, "The mechanism of oxide film formation on Alloy 690 in oxygenated high temperature water," *Corrosion Science*, vol. 53, no. 11, pp. 3853-3860, 2011/11/01/ 2011, doi: <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2011.07.038>.
- [54] G. S. Was, S. Teyseyre, and Z. Jiao, "Corrosion of Austenitic Alloys in Supercritical Water," *Corrosion*, vol. 62, no. 11, pp. 989-1005, 2006, doi: 10.5006/1.3278237.
- [55] D. A. Newsome, D. Sengupta, and A. C. T. van Duin, "High-Temperature Oxidation of SiC-Based Composite: Rate Constant Calculation from ReaxFF MD Simulations, Part II," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 117, no. 10, pp. 5014-5027, 2013/03/14 2013, doi: 10.1021/jp307680t.
- [56] Y. H. Lu, Q. J. Peng, T. Sato, and T. Shoji, "An ATEM study of oxidation behavior of SCC crack tips in 304L stainless steel in high temperature oxygenated water," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 347, no. 1, pp. 52-68, 2005/12/01/ 2005, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.07.006>.
- [57] M. Olszta, D. Schreiber, L. Thomas, and S. Bruemmer, "High-Resolution Crack Imaging Reveals Degradation Processes in Nuclear Reactor Structural

- Materials," *AM&P Technical Articles*, vol. 170, no. 4, pp. 17-21, 2012, doi: 10.31399/asm.amp.2012-04.p017.
- [58] K. Kruska, "Understanding the mechanisms of stress corrosion cracking," Oxford University, UK, 2012.
 - [59] S. M. Bruemmer and L. E. Thomas, "High-resolution Analytical Electron Microscopy Characterization of Stress Corrosion Crack Tips," Pacific Northwest National Lab.(PNNL), Richland, WA (United States), 2001.
 - [60] A. Penders, M. Konstantinović, W. Van Renterghem, R. Bosch, and D. Schryvers, "TEM investigation of SCC crack tips in high Si stainless steel tapered specimens," *Corrosion Engineering, Science and Technology*, vol. 56, no. 8, pp. 767-777, 2021.
 - [61] O. Verners and A. C. T. van Duin, "Comparative molecular dynamics study of fcc-Ni nanoplate stress corrosion in water," *Surface Science*, vol. 633, pp. 94-101, 2015/03/01/ 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.susc.2014.10.017>.
 - [62] A. Paul, T. Laurila, V. Vuorinen, and S. V. Divinski, *Thermodynamics, diffusion and the Kirkendall effect in solids*. Springer, 2014.
 - [63] R. W. Balluffi and J. W. Cahn, "Mechanism for diffusion induced grain boundary migration," *Acta Metallurgica*, vol. 29, no. 3, pp. 493-500, 1981/03/01/ 1981, doi: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(81\)90073-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(81)90073-0).
 - [64] A. H. King, "Diffusion induced grain boundary migration," *International Materials Reviews*, vol. 32, no. 1, pp. 173-189, 1987, doi: 10.1179/095066087790150304.
 - [65] D. K. Schreiber *et al.*, "Examinations of oxidation and sulfidation of grain boundaries in alloy 600 exposed to simulated pressurized water reactor primary water," *Microscopy and Microanalysis*, vol. 19, no. 3, pp. 676-687, 2013.
 - [66] K. Arioka, R. W. Staehle, T. Yamada, T. Miyamoto, and T. Terachi, "Degradation of Alloy 690 After Relatively Short Times," *Corrosion*, vol. 72, no. 10, pp. 1252-1268, 2016, doi: 10.5006/2107.
 - [67] J. Lindsay, *Stress corrosion cracking and internal oxidation of alloy 600 in high temperature hydrogenated steam and water*. The University of Manchester (United Kingdom), 2015.
 - [68] C. Guerre *et al.*, "Stress corrosion cracking of nickel base alloys in PWR primary water," in *EPJ Web of Conferences*, 2013, vol. 51: EDP Sciences, p. 04003.

- [69] T. Watanabe, "An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals," *Res mechanica*, vol. 11, no. 1, pp. 47-84, 1984.
- [70] V. Y. Gertsman and S. M. Bruemmer, "Study of grain boundary character along intergranular stress corrosion crack paths in austenitic alloys," *Acta Materialia*, vol. 49, no. 9, pp. 1589-1598, 2001.
- [71] T. R. Bieler, P. Eisenlohr, C. Zhang, H. J. Phukan, and M. A. Crimp, "Grain boundaries and interfaces in slip transfer," *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, Review vol. 18, no. 4, pp. 212-226, 2014, doi: 10.1016/j.cossms.2014.05.003.
- [72] W. Kuang, Z. Ning, H. Yue, X. Hao, and J. Li, "The correlation between the dislocation slip/grain boundary interaction mode and the resistance to SCC initiation of Alloy 690 in simulated PWR primary water," *Corrosion Science*, vol. 217, p. 111096, 2023.
- [73] F. Ford and P. Emigh, "The prediction of the maximum corrosion fatigue crack propagation rate in the low alloy steel-de-oxygenated water system at 288 C," *Corrosion Science*, vol. 25, no. 8-9, pp. 673-692, 1985.
- [74] P. L. Andresen and F. P. Ford, "Life prediction by mechanistic modeling and system monitoring of environmental cracking of iron and nickel alloys in aqueous systems," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 103, no. 1, pp. 167-184, 1988.
- [75] F. P. Ford, "Quantitative prediction of environmentally assisted cracking," *Corrosion*, vol. 52, no. 5, pp. 375-395, 1996.
- [76] D. D. Macdonald, "On the modeling of stress corrosion cracking in iron and nickel base alloys in high temperature aqueous environments," *Corrosion science*, vol. 38, no. 6, pp. 1003-1010, 1996.
- [77] E. Gutman, "An inconsistency in "film rupture model" of stress corrosion cracking," *Corrosion Science*, vol. 49, no. 5, pp. 2289-2302, 2007.
- [78] R. Rebak and Z. Szklarska-Smialowska, "The mechanism of stress corrosion cracking of alloy 600 in high temperature water," *Corrosion science*, vol. 38, no. 6, pp. 971-988, 1996.
- [79] J. Woodtli and R. Kieselbach, "Damage due to hydrogen embrittlement and stress corrosion cracking," *Engineering failure analysis*, vol. 7, no. 6, pp. 427-450, 2000.
- [80] Q. Peng, J. Kwon, and T. Shoji, "Development of a fundamental crack tip strain rate equation and its application to quantitative prediction of stress corrosion

- cracking of stainless steels in high temperature oxygenated water," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 324, no. 1, pp. 52-61, 2004.
- [81] T. Shoji, S. Suzuki, and R. Ballinger, "Theoretical prediction of SCC growth behavior--Threshold and plateau growth rate," NACE International, Houston, TX (United States), 1995.
 - [82] T. Shoji, Z. Lu, and H. Murakami, "Formulating stress corrosion cracking growth rates by combination of crack tip mechanics and crack tip oxidation kinetics," *Corrosion Science*, vol. 52, no. 3, pp. 769-779, 2010.
 - [83] Y. Gao, "Elastic-plastic fields in steady crack growth in a strain-hardening material," *5th ICF, 1981*, 1981.
 - [84] J. R. Rice and G. Rosengren, "Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 16, no. 1, pp. 1-12, 1968.
 - [85] J. Hutchinson, "Plastic stress and strain fields at a crack tip," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 16, no. 5, pp. 337-342, 1968.
 - [86] D. D. MacDonald and M. Urquidi-MacDonald, "A coupled environment model for stress corrosion cracking in sensitized type 304 stainless steel in LWR environments," *Corrosion Science*, vol. 32, no. 1, pp. 51-81, 1991.
 - [87] J. Shi, B. Fekete, J. Wang, and D. D. Macdonald, "Customization of the coupled environment fracture model for predicting stress corrosion cracking in Alloy 600 in PWR environment," *Corrosion Science*, vol. 139, pp. 58-67, 2018.
 - [88] D. Macdonald, P.-C. Lu, M. Urquidi-Macdonald, and T.-K. Yeh, "Theoretical estimation of crack growth rates in type 304 stainless steel in boiling-water reactor coolant environments," *Corrosion*, vol. 52, no. 10, pp. 768-785, 1996.
 - [89] P. L. Andresen and F. P. Ford, "Response to "On the modeling of stress corrosion cracking of iron and nickel base alloys in high temperature aqueous environments"," *Corrosion Science*, vol. 38, no. 6, pp. 1011-1016, 1996.
 - [90] J. Galvele, "A stress corrosion cracking mechanism based on surface mobility," *Corrosion science*, vol. 27, no. 1, pp. 1-33, 1987.
 - [91] J. Galvele, "Enhanced surface mobility as the cause of stress corrosion cracking," *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 133, no. 5, p. 953, 1986.
 - [92] J. Galvele, "Application of the surface-mobility stress corrosion cracking mechanism to nuclear materials," *Journal of nuclear materials*, vol. 229, pp. 139-148, 1996.

- [93] J. Galvele, "Surface mobility mechanism of stress-corrosion cracking," *Corrosion science*, vol. 35, no. 1-4, pp. 419-434, 1993.
- [94] J. Galvele, "Recent developments in the surface-mobility stress-corrosion-cracking mechanism," *Electrochimica acta*, vol. 45, no. 21, pp. 3537-3541, 2000.
- [95] E. Gutman, "Comments on the "Stress corrosion cracking of zirconium and zircaloy-4 in halide aqueous solutions" by SB Farina, GS Duffo, JR Galvele," *Corrosion science*, vol. 46, no. 7, pp. 1801-1806, 2004.
- [96] K. Sieradzki and F. Friedersdorf, "Notes on the surface mobility mechanism of stress-corrosion cracking," *Corrosion Science*, vol. 36, no. 4, pp. 669-675, 1994.
- [97] J. Galvele, "Reply to EM Gutman's:"comments on the "stress corrosion cracking of zirconium and zircaloy-4 in halide aqueous solutions" by SB Farina, GS Duffo, JR Galvele"," *Corrosion Science*, vol. 46, no. 7, pp. 1807-1812, 2004.
- [98] S. Serebrinsky, E. Carter, and M. Ortiz, "A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 52, no. 10, pp. 2403-2430, 2004.
- [99] S. Lynch, "Hydrogen embrittlement phenomena and mechanisms," *Corrosion Reviews*, Review vol. 30, no. 3-4, pp. 105-123, 2012, doi: 10.1515/corrrev-2012-0502.
- [100] Y. Huang *et al.*, "Atomistic insights into stress corrosion cracking of α -Fe in supercritical water: The coupling effect of hydrogen embrittlement and intergranular corrosion," *Computational Materials Science*, Article vol. 218, 2023, Art no. 111991, doi: 10.1016/j.commatsci.2022.111991.
- [101] D. Lee, Y. Huang, and J. D. Achenbach, "A comprehensive analysis of the growth rate of stress corrosion cracks," *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Article vol. 471, no. 2178, 2015, Art no. 20140703, doi: 10.1098/rspa.2014.0703.
- [102] F. H. Hua and R. B. Rebak, "The role of hydrogen and creep in intergranular stress corrosion cracking of Alloy 600 and Alloy 690 in PWR primary water environments — a review," in *Environment-Induced Cracking of Materials*, 2008, pp. 123-141.
- [103] Z. Wang *et al.*, "Diffusible hydrogen facilitated stress corrosion cracking in 316 stainless steel using in-situ gaseous hydrogen charging in simulated PWR environment," *Scripta Materialia*, Article vol. 255, 2025, Art no. 116390, doi: 10.1016/j.scriptamat.2024.116390.

- [104] M. Rogante, P. Battistella, and F. Cesari, "Hydrogen interaction and stress-corrosion in hydrocarbon storage vessel and pipeline weldings," *International Journal of Hydrogen Energy*, Article vol. 31, no. 5, pp. 597-601, 2006, doi: 10.1016/j.ijhydene.2005.05.011.
- [105] V. Tvergaard and J. W. Hutchinson, "The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 40, no. 6, pp. 1377-1397, 1992.
- [106] G. I. Barenblatt, "The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture," *Advances in applied mechanics*, vol. 7, pp. 55-129, 1962.
- [107] D. S. Dugdale, "Yielding of steel sheets containing slits," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 8, no. 2, pp. 100-104, 1960.
- [108] M. Kolluri, J. Hoefnagels, J. Van Dommelen, and M. Geers, "Irreversible mixed mode interface delamination using a combined damage-plasticity cohesive zone enabling unloading," *International Journal of Fracture*, vol. 185, no. 1, pp. 77-95, 2014.
- [109] G. Alfano, "On the influence of the shape of the interface law on the application of cohesive-zone models," *Composites Science and Technology*, vol. 66, no. 6, pp. 723-730, 2006.
- [110] I. Scheider and W. Brocks, "The effect of the traction separation law on the results of cohesive zone crack propagation analyses," *Key Engineering Materials*, vol. 251, pp. 313-318, 2003.
- [111] S. Li, M. Thouless, A. Waas, J. Schroeder, and P. Zavattieri, "Mixed-mode cohesive-zone models for fracture of an adhesively bonded polymer-matrix composite," *Engineering fracture mechanics*, vol. 73, no. 1, pp. 64-78, 2006.
- [112] J. L. Högberg, "Mixed mode cohesive law," *International journal of Fracture*, vol. 141, no. 3, pp. 549-559, 2006.
- [113] K. Park, G. H. Paulino, and J. R. Roesler, "A unified potential-based cohesive model of mixed-mode fracture," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 57, no. 6, pp. 891-908, 2009.
- [114] X.-P. Xu and A. Needleman, "Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix," *Modelling and Simulation in Materials Science and engineering*, vol. 1, no. 2, p. 111, 1993.
- [115] M. Sedlak, B. Alfredsson, and P. Efsing, "A cohesive element with degradation controlled shape of the traction separation curve for simulating stress corrosion and irradiation cracking," *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 193, pp. 172-196, 2018.

- [116] C. D. Shackelford and J.-M. Lee, "Analyzing diffusion by analogy with consolidation," *Journal of geotechnical and geoenvironmental engineering*, vol. 131, no. 11, pp. 1345-1359, 2005.
- [117] L. Germain, S. Jegou, and L. Barrallier, "Stress–diffusion coupling. Application to interstitial diffusion," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 279, p. 109574, 2024.
- [118] W. Araki and Y. Arai, "Molecular dynamics study on oxygen diffusion in yttria-stabilized zirconia subjected to uniaxial stress in terms of yttria concentration and stress direction," *Solid State Ionics*, vol. 181, no. 33-34, pp. 1534-1541, 2010.
- [119] Y. Ivanyts'kyi, O. Hembara, W. Dudda, V. Boyko, and S. Shtayura, "Combined fem and DIC techniques for the 2D analysis of the stress-strain fields and hydrogen diffusion near a blunt crack tip," *Strength of Materials*, vol. 54, no. 2, pp. 256-266, 2022.
- [120] F.-Z. Xuan, S.-S. Shao, Z. Wang, and S.-T. Tu, "Coupling effects of chemical stresses and external mechanical stresses on diffusion," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 42, no. 1, p. 015401, 2008.
- [121] D. De Meo, L. Russo, and E. Oterkus, "Modeling of the onset, propagation, and interaction of multiple cracks generated from corrosion pits by using peridynamics," *Journal of Engineering Materials and Technology*, vol. 139, no. 4, p. 041001, 2017.
- [122] A. Turon, C. G. Davila, P. P. Camanho, and J. Costa, "An engineering solution for mesh size effects in the simulation of delamination using cohesive zone models," *Engineering fracture mechanics*, vol. 74, no. 10, pp. 1665-1682, 2007.
- [123] W. Chell, "ASTM A 533, 352 ASTM E 399, 31 ASTM E 1152, 406."
- [124] W. Mills, "Fracture toughness of type 304 and 316 stainless steels and their welds," *International Materials Reviews*, vol. 42, no. 2, pp. 45-82, 1997.
- [125] W. Mills and C. Brown, "Fracture toughness of alloy 600 and an EN82H weld in air and water," *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 32, no. 5, pp. 1161-1174, 2001.
- [126] K. L. Auth, J. Brouzoulis, and M. Ekh, "Modeling of environmentally assisted intergranular crack propagation in polycrystals," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 124, no. 23, pp. 5183-5199, 2023.
- [127] M. O. Speidel and R. Magdowski, "Stress corrosion cracking of stabilized austenitic stainless steels in various types of nuclear power plants," in *Ninth International Symposium on Environmental Degradation of Materials in*

Nuclear Power Systems—Water Reactors, 1999: Wiley Online Library, pp. 325-329.

- [128] T. Terachi, T. Yamada, T. Miyamoto, and K. Arioka, "SCC growth behaviors of austenitic stainless steels in simulated PWR primary water," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 426, no. 1-3, pp. 59-70, 2012.

Abstract

Intergranular Stress Corrosion Cracking (IGSCC) remains a primary degradation mechanism in critical structural components, particularly within special power plant environments. Accurate prediction of component lifespan is essential for safety and operational reliability, but this may be hindered by the failure of conventional predictive models. These models, which are often uncoupled or only one-way coupled, cannot capture the fundamental synergy of IGSCC, which includes a dynamic, bidirectional feedback loop. In this process, mechanical stress fields accelerate the chemical ingress along the grain boundaries, while the resulting chemical degradation simultaneously embrittles the material, altering its fracture resistance and facilitating crack propagation.

To address this critical gap, this thesis presents the development, implementation, and validation of a transient, fully coupled chemo-mechanical model. Implemented within a MATLAB finite element framework, the model explicitly links the two domains. Mechanical fracture is governed by a Xu-Needleman cohesive zone model, where material properties are dynamically degraded by the local concentration of corrosive species. This degradation is modeled by reducing not only the fracture energy (cohesive strength) but also the material ductility by decreasing the characteristic separations. Concurrently, chemical transport is modeled via the Fick's law, enhanced with a stress-assisted diffusion term that makes the chemical flux dependent on the mechanical traction gradient. An implicit Backward Euler time integration scheme with a Newton-Raphson solver addresses the transient and non-linear nature of the system.

The model was successfully calibrated against experimental crack growth rate (CGR) data for Alloy 600 and austenitic stainless steel in simulated boiling water reactor and pressurized water reactor environments. The framework demonstrated a strong predictive power, allowing for accurate reproduction of the CGR dependence, after calibration, on both applied stress intensity factor and external environmental chemistry without requiring re-calibration.

These findings, strengthened by a comparative analysis, show that disabling the stress-assisted diffusion term obviously reduces the predicted crack growth rate and delays crack initiation, and provide quantitative confirmation that the bidirectional chemo-mechanical feedback loop is the essential mechanism governing IGSCC. This work establishes a robust, physics-based computational tool, offering a more reliable foundation for the structural integrity and lifetime assessment of critical engineering components.

Keywords: Intergranular Stress Corrosion Cracking (IGSCC), Coupled Chemo-Mechanical Model, Cohesive Zone Model (CZM), Stress-Assisted Diffusion, Crack Growth Rate (CGR), Multiphysics analysis.



University of Tehran

**College of
Engineering**

**School of
Civil Engineering**



Coupled chemical-mechanical analysis of Intergranular Stress Corrosion Cracking

A Thesis Submitted to the Graduate Studies Office

In Partial Fulfillment of the Requirements for

The Degree of Master of Science in

Civil / Structural Engineering

By:

Ali Agheli Goki

Supervisor:

Prof. Soheil Mohammadi

2025. Sept