

Ultra Yüksek Moleküler Ağırlıklı Polietilenin Çok Ölçekli Modellenmesi

Program Kodu: 3501

Proje No: 111M646

Proje Yürütücüsü:
Yrd. Doç. Dr. Ercan GÜRSES

Araştırmacı(lar):

-

Danışman(lar):

-

Bursiyer(ler):

H. Emre OKTAY (25 ay)

Farid SAEİDİ (16.5 ay)

Ali İhsan GÖLCÜK (9.5 ay)

ARALIK 2014
ANKARA

Önsöz

Bu projenin temel amacı ultra yüksek moleküler ağırlıklı polietilen (UYMAPE) için geometrik olarak doğrusal olmayan, mikromekaniksel motivasyonlu ve çok ölçekli bir malzeme modeli geliştirmek ve bu modeli kullanarak daha uzun ömürlü yeni implantların tasarımı için bilgisayarlı benzetime dayalı öngörülerde bulunmaktır. Bu amaç doğrultusunda öncelikle UYMAPE'lerin amorf ve kristal fazları için ayrı ayrı malzeme modelleri geliştirilmiştir. Geliştirilen modeller ABAQUS sonlu eleman yazılımına UMAT kullanıcı altprogramı olarak kodlanmıştır. Daha sonra iki fazlı yapıyı homojenleştirecek farklı yöntemler üzerinde çalışılmıştır. Buna paralel olarak yarı kristal polimerlerde sıklıkla görülen küresel mikroyapı idealize edilerek doğrudan sonlu elemanlar yöntemi ile analiz edilmiştir. Homojenleştirme yöntemi ile oluşturulan çok ölçekli malzeme modelinin performansının beklenenden düşük olmasından dolayı karmaşık sınır değer problemlerinin çözümü için literatürdeki mevcut bir malzeme modeli yine UMAT kullanıcı altprogramı şeklinde ABAQUS sonlu eleman yazılımına kodlanmıştır. Son olarak, UMAT kullanıcı altprogramı olarak kodlanan malzeme modeli kullanılarak farklı yüzey dokularının (surface texture) UYMAPE'in sürtünme katsayısını ne şekilde etkilediği sonlu eleman analizleri ile incelenmiş ve ne tip yüzey dokularının makroskopik sürtünme katsayısını azaltabileceği tespit edilmiştir.

111M646 numaralı "Ultra Yüksek Moleküler Ağırlıklı Polietilenin Çok Ölçekli Modellenmesi" isimli bu proje Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu'nun Kariyer Geliştirme Programı (3501) kapsamında desteklenmiştir. Proje 01/05/2012 tarihinde başlamış ve Orta Doğu Teknik Üniversitesi Havacılık ve Uzay Mühendisliği Bölümü öğretim üyelerinden Yrd. Doç. Dr. Ercan Gürses'in yürütücülüğünde 01/11/2014 tarihinde sona ermiştir. Proje süresince Hasan Emre Oktay, Farid Saeidi ve Ali İhsan Gölcük belli dönemlerde bursiyer olarak çalışmışlardır. Proje süresince elde edilen sonuçlar ulusal ve uluslararası kongrelerde sözlü olarak sunulmuş ve konferans bildirisi olarak yayınlanmıştır. Bir adet uluslararası dergi yayını hakemlerin değerlendirme aşamasındadır. Proje konusundaki ilave yayın çalışmaları halen devam etmektedir.

Projeye katkılarından dolayı TÜBİTAK'a teşekkürlerimizi sunarız.

İçindekiler

Önsöz.....	i
Tablolar	iv
Şekiller	v
Özet.....	xv
Abstract.....	xvi
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ÖZETİ.....	3
2.1. Yarı-Kristal Polimerlerin Özellikleri, Şekil Değişirme Mekanizmaları ve Modellenmesi	3
2.2. Diz İmplantlarındaki UYMAPE Bileşenler, Performansları ve Hasar Tipleri	11
2.2.1. Diz İmplantlarının Yapısı.....	11
2.2.2. Tibyal Taşıyıcıda Görülen Belli Başlı Yüzey Hasarları.....	14
2.2.3. Tibyal Taşıyıcının Aşınma Direncinin Artırılması İçin Kullanılan Teknikler	15
Yüzey Dokusu Kullanılarak Tibyal Taşıyıcı Aşınma Direncinin Artırılması	18
3. GEREÇ VE YÖNTEM	19
3.1. Amorf ve Kristal Fazlar İçin Malzeme Modellerinin Geliştirilmesi	19
3.1.1. Amorf Faz İçin Malzeme Modelinin Geliştirilmesi	19
3.1.2. Kristal Faz İçin Malzeme Modelinin Geliştirilmesi	35
3.2. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirecek Bir Yöntemin Geliştirilmesi	44
3.2.1. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirme Yöntemi (Afin Model).....	44
3.2.2. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirme Yöntemi (Afin Olmayan Model)	48
3.3. Küresel Mikro-Yapının Sonlu Eleman Analizleri	59
3.3.1. Küresel Mikro-Yapıdaki Dilim Sayısının Etkisini İnceleyen Analizler	60
3.3.2 Küresel Mikro-Yapının Boyutunun Etkisini İnceleyen Analizler.....	77
3.4. İmplant Tasarımına Yönelik Sayısal Benzetimlerin Yapılması	85
3.4.1. Bergstrom ve Bischoff (2010) Üç Ağ Modeli	85
3.4.2. Yüzey Dokusunun Sürtünme Katsayısı Üzerindeki Etkisini İnceleyen Analizler... ..	89
4. BULGULAR.....	95
4.1. Çukurları Boş Olan Yüzeyler	95

4.2. Çukurların Çap / Derinlik Oranlarının Etkisi	100
4.3. Yükleme Hızının Etkisi.....	101
4.4. Çukurların Neo-Hookean Bünye Denklemi İle Tanımlanan Dolgu Malzemesi İle Doldurulması	102
4.4.1. Dolu Çukurların Çap / Derinlik Oranlarının Etkisi.....	103
4.4.2. Neo-Hookean Dolgu Malzemesi Bünye Denklemi Sabitlerinin Etkileri	105
4.4.3. Düşey Yük Seviyesinin Dolu ve Boş Çukurlar İçin Etkisi	106
4.4.4. Dolgu Malzemesinin Farklı Mekanik Özellikli UYMAPE Olarak Modellenmesi...	109
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	110
6. Kaynaklar	112
7. Ekler	118

Tablolar

Tablo 1. Afin olmayan mikro-küre modelinin uygulaması.....	27
Tablo 2. Afin mikro küre modelinin uygulaması	28
Tablo 3. Küre yüzeyinde alınan numerik integral için integrasyon noktaları ve ağırlıkları (Bazant ve Oh, 1986)	30
Tablo 4. Polietilen kristallerindeki kayma sistemleri	37
Tablo 5. Polietilen kristalin elastik sabitleri (GPa) (Choy ve Leung, 1985).....	37
Tablo 6. Kristal viskoplastisite modelinin uygulaması	38
Tablo 7. Analizlerde kullanılan malzeme parametreleri	60
Tablo 8.Üç ağ modelininmalzeme parametreleri ve %61 kristallik derecesine sahip UYMAPE'nin oda sıcaklığındaki davranışını modellemek için seçilen değerleri.....	87
Tablo 9. Farklı desenler için çukur çapları ve çukurlar arasındaki mesafeler	92

Şekiller

Şekil 1. (a) 1960'lı yıllarda kullanılan (b) modern implant tasarımları	12
Şekil 2. İmplant uygulanmış diz ekleminin, diz düz ve bükülü durumda iken görünümü (UYMAPE parça röntgende saydam olarak görülmektedir) (Kurtz vd., 2004).....	13
Şekil 3. İmplantlı dizde UYMAPE aşınmasına bağlı olarak ortaya çıkan kemik erimesi (Kurtz vd., 2004)	14
Şekil 4. Tibyal bileşende görülen yüzey hasarları (Kurtz vd., 2004)	15
Şekil 5. Dizin dönerek kayma hareketi (Kurtz vd., 2004)	16
Şekil 6 Insall-Burstein ve Miller-Gallente türü tibyal taşıyıcılar (Kurtz vd., 2004)	18
Şekil 7. Serbest bir polimer zincirinin geometrisi (Miehe vd. 2004). Zincirin bir ucunun diğer ucuna olan uzaklığı r , parça uzunluğu l , parça sayısı N ve kontur uzunluğu $L = N \cdot l$ 'dir..	21
Şekil 8. Çapı d olan bir tüp tarafından sınırlandırılan zincir geometrisi (Miehe vd., 2004). ...	21
Şekil 9. Gauss ve Langevin istatistiklerini kullanarak hesaplanan aksenal kuvvet $\tilde{F}_f(r) = \partial \tilde{F}_f(r) / \partial r$ ile zincirin uçtan uca olan uzaklığı r (Miehe vd., 2004).	23
Şekil 10. Tüp kısıtlamasından kaynaklanan yarıçapsal kuvvetin tüp yarıçapına bağlı değişimi (Miehe vd., 2004).	24
Şekil 11. Birim küre üzerinde birim yön vektörü \mathbf{t} 'nin açılar (ϑ, φ) 'ye bağlı olarak parametrik gösterimi (Miehe vd., 2004).....	26
Şekil 12. Kesme katsayısının bir aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(a)'daki eğri.	32
Şekil 13. Kesme katsayısının eş-iki aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(b)'deki eğri.	32
Şekil 14. Zincirdeki segment sayısının bir aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(c)'deki eğri.	32
Şekil 15. Zincirdeki segment sayısının eş-iki aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(d)'deki eğri.	32
Şekil 16. p-kökü ortalama operatöründeki kuvvetin bir aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(e)'deki eğri.....	32
Şekil 17. p-kökü ortalama operatöründeki kuvvetin eş-iki aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(f)'deki eğri.....	32
Şekil 18. Tüp geometrisi parametresi U 'nun bir aksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(a)'daki eğri.....	33

Şekil 19. Tüp geometrisi parametresi U 'nun eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(b)'deki eğri.	33
Şekil 20. q parametresinin bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(c)'deki eğri.	33
Şekil 21. q parametresinin eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(d)'deki eğri.	33
Şekil 22. Mikro-küre modelinin tek eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 14(a)'daki eğri.	34
Şekil 23. Mikro-küre modelinin eş iki eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 14(b)'deki eğri.	34
Şekil 24. Mikro-küre modelinin eş iki eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 15(a)'daki eğri.	34
Şekil 25. Mikro-küre modelinin tek eksenli basma deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 15(b)'deki eğri.	34
Şekil 26. Deformasyon gradyan tensörü F 'in çarpımsal ayrışımının mikromekaniksel motivasyonu (de Souza Neto vd. 2008)	35
Şekil 27. (a) Polietilen kristal kafesinin ortorombik birim hücresi (Calister, 2007). Polimer kristallerde gözlemlenen (b) polimer zincirine paralel yönde kayma ve (c) polimer zincirine dik yönde kayma (Bartczak ve Galeski, 2010).	36
Şekil 28. Malzeme parametresi n 'in bir eksenli çekme davranışına etkisi	39
Şekil 29. Malzeme parametresi τ_0 'nun bir eksenli çekme davranışına etkisi.....	39
Şekil 30. Malzeme parametresi $\dot{\gamma}_0$ 'ın bir eksenli çekme davranışına etkisi	40
Şekil 31. Farklı yükleme hızlarında $n = 2$ için bir eksenli çekme davranışı	40
Şekil 32. Farklı yükleme hızlarında $n = 1$ için bir eksenli çekme davranışı	40
Şekil 33. Yüzey merkezli küp kafes kristalin [001] eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyi sonucunda oluşan on iki farklı kayma sistemindeki $\dot{\gamma}^\alpha$ değerleri. Dört sistem etkin hale geçmezken sekiz sistem aynı miktarda etkinleşmekte.	42
Şekil 34. Yüzey merkezli küp kafes kristalin [111] eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyi sonucunda oluşan 12 farklı kayma sistemindeki $\dot{\gamma}^\alpha$ değerleri. Altı sistem etkin hale geçmezken altı sistem aynı miktarda etkinleşmektedir.	43

Şekil 35. Tek eksenli çekme testi. 1-yönünde çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin kullanılan kristal sayısı ile değişimi. Analizler ortorombik kristaller için yapılmıştır.	46
Şekil 36. Tek eksenli çekme testi. 1 ve 3-yönlerinde yapılan çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin uyumunun kullanılan kristal sayısı ile değişimi. Analizler ortorombik kristaller için yapılmıştır.	46
Şekil 37. Tek eksenli çekme testi. Farklı tohum değerlerinin 1-yönündeki tek eksenli çekme gerilim-gerinim eğrilerine etkisi. Analizler 20000 kristal ile yapılmıştır.	46
Şekil 38. Tek eksenli çekme testi.1-yönünde çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin kristal fazın hacimsel oranına bağlı değişimi.....	48
Şekil 39. İlk elastik modülün (initial elastic modulus) kristal fazın hacimsel oranını ile değişimi	48
Şekil 40. Küresel kristal mikro-yapının ve kristal ve amorf fazlardan oluşan iki dilimin arasındaki arayüzün ve normal vektörünün şematik olarak gösterimi.	48
Şekil 41. Dört amorf ve dört kristal fazdan oluşan ve amorf ve kristal fazların hacim oranları $v_c = v_a = 0.5$ olan mikro-yapı.	50
Şekil 42. Son ara yüzleri serbest bırakılan farklı dilim sayısına sahip analizlerin gerilim – gerinim eğrileri.....	58
Şekil 43. Son arayüz ve ilk arayüzün serbest bırakıldığı modellerin tek eksenli çekme yüklemesi gerinim-gerilim eğrilerinin karşılaştırması.....	58
Şekil 44. Tüm sonlu elemanlar analizlerinde kullanılan kare kesitli dikdörtgenler prizması şeklindeki model ve boyutları	60
Şekil 45. 32 dilimli küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 4512 adet sonlu elemandan oluşan ağ	61
Şekil 46. 32 dilimli küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 560 adet sonlu elemandan oluşan ağ	61
Şekil 47. Şekil 45 ve Şekil 46'daki ağ yapıları ile çözülen 32 dilimli küresel mikro-yapının basit çekme, basma ve kesme yüklemeleri sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	61
Şekil 48. 16 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.	62
Şekil 49. 8 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.	62

Şekil 50. 4 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.	62
Şekil 51. 32 dilimli küresel mikro-yapı analizleri için kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin <i>a</i> yönünü, mavi doğrular <i>b</i> yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan <i>c</i> yönünü göstermektedir.	63
Şekil 52. 4 dilimli küresel mikro-yapı analizleri için kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin <i>a</i> yönünü, mavi doğrular <i>b</i> yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan <i>c</i> yönünü göstermektedir.	63
Şekil 53. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit kesme analizlerinin sınır koşulları	64
Şekil 54. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit çekme analizlerinin sınır koşulları	64
Şekil 55. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit basma analizlerinin sınır koşulları	64
Şekil 56. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	65
Şekil 57. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	65
Şekil 58. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	65
Şekil 59. 16 dilimli küresel mikro-yapının şekil değiştirmemiş model görünümü. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.....	67
Şekil 60. 16 dilimli küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	67
Şekil 61. 16 dilimli küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.....	67
Şekil 62. 16 dilimli küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	67

Şekil 63. 16 dilimli küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.....	67
Şekil 64. 16 dilimli küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	68
Şekil 65. 16 dilimli küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.....	68
Şekil 66. Basit çekme analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	68
Şekil 67. Basit basma analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	69
Şekil 68. Basit kesme analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	69
Şekil 69. Basit çekme analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.....	69
Şekil 70. Basit basma analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.....	70
Şekil 71. Basit kesme analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.....	70
Şekil 72. Kristallik oranı etkilerini incelemek için kullanılan 50%, 62.5%, 75% ve 87.5% kristallik oranlarına sahip tek küresel mikro-yapı modelleri.....	70
Şekil 73. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	71

Şekil 74. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	71
Şekil 75. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri	71
Şekil 76. Basit çekme analizleri ile elde edilen yükleme başındaki elastik sertliğin kristallik oranıyla değişiminin Crist vd. (1989) deneysel sonuçları ile kıyaslanması	72
Şekil 77. Basit çekme analizleri ile elde edilen akma geriliminin kristallik oranıyla değişiminin Crist vd. (1989) deneysel sonuçları ile kıyaslanması	72
Şekil 78. Çekme eksenine göreceli olarak ekvatorial, polar ve eğimli bölgelerin küresel mikro-yapı üzerinde gösterimi	72
Şekil 79. Kristal dilimlerin numaralandırma sistemi. x-ekseni çekme testlerindeki çekme yönünü göstermektedir.....	73
Şekil 80. Basit çekme testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı	74
Şekil 81. Basit basma testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı	76
Şekil 82. Basit kesme testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı	77
Şekil 83. 2x2 adet küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 4480 adet sonlu elemandan barındıran ağ	78
Şekil 84. 2x2 adet küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 2240 adet sonlu eleman barındıran ağ	78
Şekil 85. Şekil 83'te ve Şekil 84'daki ağ yapıları ile çözülen 2x2 adet küresel mikro-yapının basit çekme yüklemesi sonlu elemanlar analizlerinin yük – deformasyon eğrileri	78
Şekil 86. Eş hacimde 2x2adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.....	79
Şekil 87. Eş hacimde 3x3 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.....	79
Şekil 88. Eş hacimde 4x4 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.....	79

Şekil 89. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı bulunduran analizin kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin <i>a</i> yönünü, mavi doğrular <i>b</i> yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan <i>c</i> yönünü göstermektedir.	80
Şekil 90. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit kesme analizlerinin sınır koşulları	80
Şekil 91. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit çekme analizlerinin sınır koşulları	80
Şekil 92. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit basma analizlerinin sınır koşulları	81
Şekil 93. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri.....	81
Şekil 94. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri.....	82
Şekil 95. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri.....	82
Şekil 96. Eş hacimde 4x4adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun şekil değiştirmemiş model görünümü. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	83
Şekil 97. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	83
Şekil 98. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.	83
Şekil 99. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	83
Şekil 100. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.	83
Şekil 101. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.	84

Şekil 102. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının basma analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.	84
Şekil 103. Çekme yüklemesi analizleri için şekil değiştirmiş model ve von Mises gerilimlerinin dağılımı	85
Şekil 104. Üç ağ modelinin reolojik gösterimi (Berstrom ve Bishoff, 2010).....	86
Şekil 105. UYMAPE için tipik bir basit çekme deneyi gerçek gerilim-gerçek gerilim eğrisinde viskoplastik etkinin ve entropik direnç etkisinin baskın olduğu kısımların gösterimi (Berstrom ve Bishoff, 2010)	86
Şekil 106. Nominal gerinim cinsinden tanımlı farklı yükleme hızları için makaledeki basit çekme ve basma gerinim-gerilim eğrileri ile malzeme noktasındaki analiz sonuçlarının karşılaştırması.....	89
Şekil 107. Rijit küre ve UYMAPE parçanın yerleşimi ve boyutları.....	90
Şekil 108. Analizin yükleme adımları: (a) küre üzerine 17N'luk düşey yükün uygulanması, (b) düşey kuvvet sabit tutulurken, kürenin x yönünde 2.1mm ilerletilmesi.....	90
Şekil 109. UYMAPE yüzey üzerindeki 1.2mm kenar uzunluğuna sahip kare biçimli kontrol alanı, rijit kürenin ilk temas noktası (başlangıç noktası) ve bu noktanın x yönünde 2.1 mm ilerletilmiş konumu (bitiş noktası)	91
Şekil 110. Sırasıyla 3x3, 2x2 ve 1x1'lik çukur desenli kontrol alanları için UYMAPE parçanın yüzeyinin plan görünümü	91
Şekil 111. UYMAPE parçanın sınır koşulları. Taban yüzeyindeki düğüm noktaları tamamen sabit iken, yan yüzeylerdeki düğüm noktalarının hareketi sadece yüzeye normal olan doğrultuda kısıtlanmıştır.....	92
Şekil 112. Ağ sıklığının sürüklenme güzergahı boyunca analizden elde edilen sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi	93
Şekil 113. Farklı çukur desenleri için yapılan ağ hassasiyeti çalışmasında kullanılan sıkı ve normal sonlu elemanlar ağları.....	93
Şekil 114. Farklı sonlu elemanlar ağları ile bulunan çukursuz yüzey için sürtünme katsayısının değişimi sürüklenme güzergahı boyunca değişimi	94
Şekil 115. Çukursuz yüzey için lokal sürtünme katsayısı ve homojenize sürtünme katsayısının kürenin merkezinin konumu ile değişimi ve homojenize sürtünme katsayısının değeri	95

Şekil 116. 1x1'lik desende 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzey için lokal sürtünme katsayısının küre merkezinin konumu ile değişimi	96
Şekil 117. F düşey kuvvetine maruz kalan kürenin teması sonucu deforme olan yüzey	96
Şekil 118. 1x1'lik desen için (a) yüzeye paralel ve dik temas kuvvetlerinin sürtünme kuvvetine katkısı (b) ürenin düşey deplasmanının küre merkezinin konumu ile değişimi	97
Şekil 119. Kürenin merkezinin x-koordinatının, sürüklenme güzergahı boyunca çukurun belirli noktalarında bulunduğu durum için UYMAPE parçanın şekil değiştirmiş ağında düşey deplasman bileşenlerinin dağılımı. Deformasyonlar 5 kat büyütülmüştür.	99
Şekil 120. 2x2 ve 3x3'lük desende 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzey için lokal sürtünme katsayısının kürenin konumu ile değişimi.....	99
Şekil 121. 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip ilerleyen kürenin, ilerleme güzergahı boyunca düşey deplasmanının, çukur desenine bağlı değişimi	100
Şekil 122. 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzeyler için homojenize sürtünme katsayısının çukur deseni ile değişimi ve çukursuz yüzey sürtünme katsayısı ile karşılaştırması.....	100
Şekil 123. Sonlu elemanlar modelinin 1x1 ve 3x3 çukur desenleri ve farklı çap/derinlik oranları için enkesit görünümü, (Çukurlar boştur, ayırt edilebilirliğin artması için farklı renkte gösterilmektedir.).....	101
Şekil 124. 1x1 ve 3x3'lük desenlerdeki boş olan çukurların çap/derinlik oranının lokal ve homojenize sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi.....	101
Şekil 125. 1x1'lik desende $\text{Ç/D}=2$ çap derinlik oranına sahip boş çukurlar barındıran yüzey için yükleme hızının lokal sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi	102
Şekil 126. Homojenize sürtünme katsayısının çukur deseni ve dolgu maddesi kesme modülü ile değişimi	103
Şekil 127. Homojenize sürtünme katsayısının, farklı çukur desenleri ve çap/derinlik oranları için dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi.....	103
Şekil 128.1x1'lik desende çukurlar barındıran yüzeyin homojenize sürtünme katsayısının, farklı çap / derinlik oranları için dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi	104
Şekil 129. Kesme modülü 10 MPa olan dolgu malzemesi ile doldurulmuş çukurları farklı desene çap/derinlik oranlarına sahip yüzeylerin, lokal sürtünme katsayılarının küre ilerleme güzergahı boyunca değişimi	104

Şekil 130.Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli $2\mu=20\text{MPa}$ dolgu malzemesi ile dolu çukurları bulunan yüzeyin (a) homojenize ve (b) lokal sürtünme katsayılarının dolgu malzemesi bulk modülü ile değişimi.....	105
Şekil 131. Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli $K=2200\text{ MPa}$ dolgu malzemesi ile dolu çukurları bulunan yüzeyin (a) homojenize ve (b) lokal sürtünme katsayılarının dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi.....	106
Şekil 132.Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli (a) dolu ve (b) boş çukurları bulunan yüzeyler için lokal sürtünme katsayılarının düşey yük seviyesi ile değişimi.....	107
Şekil 133. Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli dolu (a) ve boş (b) çukurları bulunan yüzeyler için kürenin düşey deplasmanının farklı düşey yük seviyeleri için güzergah boyunca değişimi	108
Şekil 134. Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli dolu ve boş çukurları bulunan yüzeyler ile çukur bulunmayan yüzeylerin homojenize sürtünme katsayılarının düşey yük seviyesi ile değişimi	108
Şekil 135. Ç/D=1 oranlarına sahip 1x1'lik desenli çukurları bulunan yüzeyin lokal ve homojenize sürtünme katsayılarının dolgu malzemesinin kesme modülü ile değişimi	110
Şekil 136. Kürenin merkezinin x-koordinatının, sürüklenme güzergahı boyunca çukurun belirli noktalarında bulunduğu durum için 3x3'lük desende 0.4 mm derinlikte çukurları bulunan UYMAPE parçanın şekil değiştirmiş ağında düşey deplasman bileşenlerinin dağılımı. Deformasyonlar 5 kat büyütülmüştür.	120

Özet

Bu projede yarı-kristal polimerler için mikromekaniksel temellere dayalı çok ölçekli malzeme modeli geliştirildi. Projenin Mayıs 2012 – Kasım 2012 arasındaki ilk döneminde iki fazlı bir yapıya sahip olan UYMAPE'in her bir fazı için farklı malzeme modellerinin üzerinde çalışıldı. Bu çalışmanın neticesinde UYMAPE'in amorf fazı için mikro-küre modelinin, kristal fazı için ise kristal viskoplastisitesi modelinin kullanımına karar verildi. Bir sonraki Kasım 2012 – Mayıs 2013 döneminde her bir fazın bünye denklemleri ABAQUS sonlu elemanlar yazılımına UMAT altprogramı olarak kodlandı. Bu dönemde ayrıca iki fazlı yapının ortalama mekanik davranışını hesaplayacak Taylor tipi bir homojenleştirme yöntemi üzerinde çalışıldı. Mayıs 2013 – Kasım 2013 tarihleri arasındaki üçüncü dönemde ise yarı kristal polimerlerde gözlemlenen küresel mikro-yapıyı dikkate alan bir homojenleştirme yöntemi teorik olarak geliştirildi. Bu çalışmaya paralel olarak idealize edilmiş iki fazlı bir küresel yapı farklı yükleme koşulları altında doğrudan sonlu elemanlar yöntemi ile analiz edildi. Projenin Kasım 2013 – Mayıs 2014 arasındaki dördüncü döneminde bir önceki dönemde teorik altyapısı hazırlanmış olan homojenleştirme yöntemi kodlandı. Projenin Mayıs 2014 – Kasım 2014 arasındaki en son döneminde ise kodlanan homojenleştirme yönteminin istenen verimde çalışmamasından dolayı literatürden UYMAPE malzemesi için önerilmiş bir malzeme modeli bulundu ve bu model ABAQUS sonlu elemanlar yazılımına UMAT altprogramı olarak kodlandı. Daha sonra bu model ile diz eklemesindeki yükleme durumuna benzer sürtünme koşullarında sonlu eleman analizleri yapıldı. Son olarak UYMAPE implantın yüzeyinde yüzey dokuları kullanılarak makroskopik sürtünme katsayısının düşürülmesine yönelik çalışmalar yapıldı.

Anahtar Kelimeler: Çok ölçekli modelleme, sonlu elemanlar yöntemi, yarı kristal polimerler, bünye denklemleri, sürtünme, ortopedik implant

Abstract

In this project, a micromechanically-based multi-scale material model has been developed for semi-crystalline polymers. In the first period of the project between May 2012 – November 2012, studies on the material models for individual phases of UHMWPE (ultra high molecular weight polyethylene) have been conducted and the constitutive equations to be used for individual phases have been determined. It has been decided to use the micro-sphere model for the amorphous phase and the crystal viscoplasticity for the crystalline phase. In the next period, between November 2012 – May 2013, the constitutive models for the individual phases have been implemented to ABAQUS software as UMAT subroutines. Furthermore, in this period, a Taylor-type homogenization scheme for the homogenized mechanical response of two-phase micro-structure of UHMWPE has been studied. In May 2013 – November 2013 period of the project, a homogenization approach that takes into account the spherulite micro-structure of UHMWPE has been theoretically developed. In parallel with this work, an idealized two-phase spherulite microstructure has been discretized with finite elements and analyzed under different loading conditions. The homogenization scheme developed in the previous period has been implemented in November 2013 – May 2014 period of the project. In the last period, between May 2014 – November 2014 a constitutive model for UHMWPE has been found from the literature and implemented into ABAQUS as a UMAT subroutine due to poor performance of the developed homogenization scheme. Later finite element analyses of a model problem having loading conditions similar to knee joint have been conducted using this material model of UHMWPE. Finally, studies to reduce the macroscopic friction coefficient of UHMWPE implants by using surface texture effects have been conducted.

Keywords: Multiscale modeling, finite element method, semicrystalline polymers, friction, constitutive equations, orthopedic implant

1. GİRİŞ

Modern yaşamda bir çok uygulama alanı bulunan polimerler önemli bir malzeme sınıfını oluştururlar. Ultra yüksek moleküler ağırlıklı polietilen (UYMAPE), yüksek yoğunluklu polietilen (YYPE), naylon-6, polietilen tereftalat (PET), isotaktik polipropilen (iPP) gibi yarı-kristal polimerler (YKP) polimerlerin teknolojik ve endüstriyel öneme sahip bir alt grubunun tipik örnekleridir. Yukarıda belirtilen YKP'ler arasında molekül ağırlığı milyonlar düzeyinde bir termoplastik polietilen olan UYMAPE son derece uzun zincir yapısına sahiptir. UYMAPE'lerde mevcut olan bu uzun zincir yapı moleküller arası etkileşimin güçlenmesini ve bu sayede polimer omurgasına daha etkili yük transferinin gerçekleşmesini sağlar. Bu etkili yük transferinin sonucunda UYMAPE diğer termoplastiklere göre daha toktur ve daha yüksek darbe dayanımına sahiptir. Ayrıca, UYMAPE aşınmaya ve korozyon kimyasallara karşı son derece dayanıklı, son derece düşük nem emme özelliğine ve çok düşük bir sürtünme katsayısına sahiptir. Üstün tokluk, aşınma direnci, biyouyumluluk ve mükemmel kimyasal direnç özelliklerinden dolayı UYMAPE bir çok endüstride yaygın olarak kullanılır. Kalça ve diz eklemi protezleri için kullanılan implantlar UYMAPE'in en önemli kullanım alanlarından birini oluşturur. Her yıl dünyada yaklaşık 2 milyon eklem değiştirme operasyonu gerçekleştirilmekte ve bunların çoğunluğunda UYMAPE kullanılmaktadır (Kurtz, 2014). Kalça protezi ameliyatı, dünyada çok sıklıkla yapılmakta (örneğin, Almanya'da 170000/yıl, İngiltere ve Galler'de 65000/yıl (Dreinhöfer vd., 2006)) ve bu nedenle ülkelerin sağlık sistemlerine önemli derecede ekonomik yük getirmektedir. Eklem protezleri için talep son 10 yılda sürekli artmakta ve yaşlanan nüfusa ve bu tedavinin uygulandığı yaş aralığının genişlemesine bağlı olarak bu artışın devam etmesi beklenmektedir. Bu restoratif prosedürlerin başarısına rağmen, implantlar sınırlı bir ömre sahiptirler, ve bu nedenle daha uzun ömürlü yeni implant tasarımlarına ihtiyaç vardır.

Bu projenin temel amacı UYMAPE'ler için geometrik olarak doğrusal olmayan, mikromekaniksel motivasyonlu ve çok ölçekli bir malzeme modeli geliştirmek ve geliştirilen model kullanılarak daha uzun ömürlü implant tasarımlarına yol göstermektir. Bu temel amaç dahilinde, otuz aylık proje süresince yapılmış olan çalışmalar aşağıda özetlenmiştir:

(1) Amorf ve kristal fazlar için malzeme modellerinin geliştirilmesi: Bu amaç doğrultusunda öncelikle UYMAPE'lerin amorf ve kristal fazlarındaki en önemli deformasyon mekanizmaları saptanmış ve bu saptamaların ışığında her iki faz için kullanılacak malzeme modellerine karar verilmiştir. Projede polimerlerin camlaşmaya geçiş sıcaklığından ($T_g \approx -120^\circ\text{C}$) yüksek derecelerdeki durumlar incelendiğinden

UYMAPE'in amorf fazının kauçuksu davrandığı durumlar göz önüne alınmıştır. Bu bağlamda UYMAPE'in amorf fazı için kauçuksu polimerlerin elastik davranışlarını başarılı şekilde modelleyen mikro-küre modelinin (Miehe vd., 2004) kullanımına karar verilmiştir. UYMAPE'in kristal fazı için ise klasik kristal viskoplastisite teorisine dayanan bir modelin (van Dommelen vd., 2003) kullanımına karar verilmiştir. Her iki faz için kullanmasına karar verilen modeller ABAQUS sonlu elemanlar yazılımına UMAT altprogramları şeklinde kodlanmıştır.

- (2) **İki fazlı yapıyı homojenleştirecek bir yöntemin geliştirilmesi:** UYMAPE'de gözlemlenen mikroyapısal morfolojilerden biri *küresel mikro-yapıdır (spherulite)*. Küresel mikro-yapı radyal yönde yayılan kristal lameller ve onların arasında bulunan amorf moleküler zincir bölgelerinden oluşur. Proje kapsamında küresel mikro-yapı morfolojisini amorf ve kristal dilimlerden oluşan bir disk şeklinde idealize eden bir homojenleştirme yöntemi teorik olarak geliştirilmiş ve bağımsız bir FORTRAN programı olarak kodlanmıştır. Ama geliştirilen yöntemin beklenen performansı göstermemesi ve hesaplama süresinin çok uzun olmasından dolayı bu yöntem ABAQUS sonlu eleman yazılımı ile bütünleştirilmemiştir.
- (3) **Küresel mikro-yapının sonlu eleman analizleri:** Homojenleştirme yönteminin geliştirilmesine paralel olarak küresel mikro-yapı doğrudan sonlu elemanlar ile analiz edilmiştir. Bu analizlerde küresel mikro-yapı amorf ve kristal dilimlerden oluşan bir disk şeklinde idealize edilmiş ve dilimler sonlu elemanlar ile ayrıklaştırılmıştır (discretized). Daha sonra geliştirilen sonlu eleman modeli çekme, basma ve kesme yük koşulları altında incelenmiştir. Dilim sayısı ve mikro-yapının büyüklüğünün mekanik davranışa olan etkileri incelenmiştir.
- (4) **İmplant tasarımına yönelik sayısal benzetimlerin yapılması:** Geliştirilen çok ölçekli modelin istenen performansı göstermemesinden dolayı implant tasarımına yönelik sonlu eleman analizlerinde literatürde UYMAPE için geliştirilmiş modellerden birinin kullanımına karar verilmiştir (Bergström ve Bischoff, 2010). Bu model ABAQUS sonlu elemanlar yazılımı ile UMAT altprogramı aracılığıyla bütünleştirilmiştir. Daha sonra diz eklemlerinin maruz kaldığı yükleme durumuna benzer şekilde bir yükleme durumunda UYMAPE implanta farklı yüzey dokuları (surface texture) tanımlanarak UYMAPE'in makroskopik sürtünme katsayısının azaltılmasına çalışılmış ve belli yüzey dokuları için sürtünme katsayısının azaltılabildiği gösterilmiştir.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1. Yarı-Kristal Polimerlerin Özellikleri, Şekil Değişirme Mekanizmaları ve Modellenmesi

Modern yaşamda bir çok uygulama alanı bulunan polimerler önemli bir malzeme sınıfını oluştururlar. Ultra yüksek moleküler ağırlıklı polietilen (UYMAPE), yüksek yoğunluklu polietilen (YYPE), naylon-6, polietilen tereftalat (PET), isotaktik polipropilen (iPP) gibi yarı-kristal polimerler (YKP) polimerlerin teknolojik ve endüstriyel öneme sahip bir alt grubunun tipik örnekleridir. Yukarıda belirtilen YKP'ler arasında molekül ağırlığı milyonlar düzeyinde bir termoplastik polietilen olan UYMAPE son derece uzun zincir yapısına sahiptir. UYMAPE'lerde mevcut olan bu uzun zincir yapı moleküller arası etkileşimin güçlenmesini ve bu sayede polimer omurgasına daha etkili yük transferini sağlar. Bu etkili yük transferinin sonucunda UYMAPE diğer termoplastiklere göre daha toktur ve daha yüksek darbe dayanımına sahiptir. Ayrıca, UYMAPE aşınmaya ve korozyon kimyasallara karşı son derece dayanıklı, son derece düşük nem emme özelliğine ve çok düşük bir sürtünme katsayısına sahiptir. Üstün tokluk, yüksek aşınma direnci, biyo-uyumluluk ve mükemmel kimyasal direnç özelliklerinden dolayı UYMAPE bir çok endüstride yaygın olarak kullanılır. Dünyada üretilen UYMAPE'in 90%'ından fazlası endüstride kullanılmaktadır. Örnek olarak kesilmeye dirençli eldivenler, yay kirişleri, misinalar, paraşüt ve yamaç paraşütlerinin süspansiyon hatları, kasklar ve kurşun geçirmez yelekler verilebilir. Ayrıca, yaygın olarak, kalça ve diz eklemi protezleri için kullanılan implantların yapımında kullanılır. Her yıl dünyada yaklaşık 2 milyon eklem değiştirme operasyonu gerçekleştirilmekte ve bunların çoğunluğunda UYMAPE kullanılmaktadır. Eklem protezleri için talep son 10 yılda sürekli artmakta ve yaşlanan nüfusa ve bu tedavinin uygulandığı yaş aralığının genişlemesine bağlı olarak bu artışın devam etmesi beklenmektedir. Bu restoratif prosedürlerin başarısına rağmen, implantlar sınırlı bir ömre sahiptirler ve bu nedenle daha uzun ömürlü implant tasarımlarına ihtiyaç vardır.

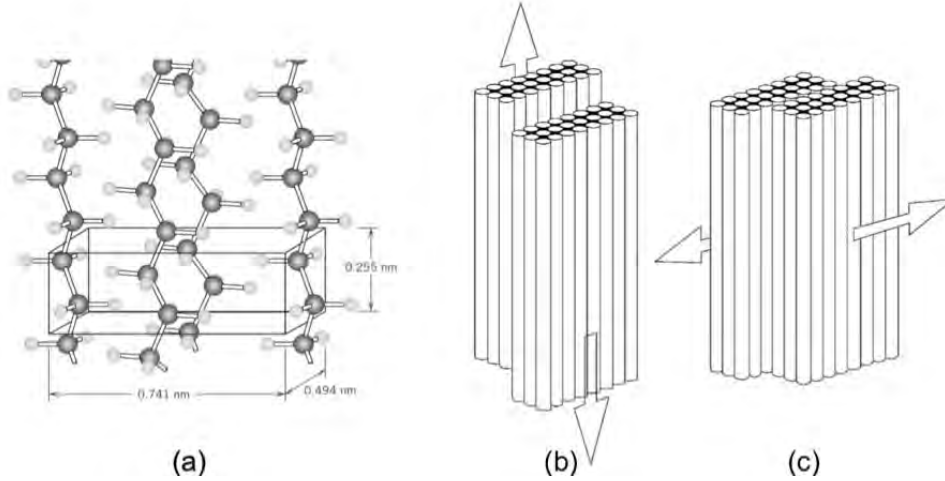
UYMAPE gibi YKP'ler içlerinde hem elastikiyet sağlayan yumuşak amorf yapıyı hem de mukavemeti ve bükülmezliği sağlayan kristal yapıyı bulundurlar. Bu yüzden UYMAPE ne tam olarak amorf malzeme, ne de tam olarak kristal yapı malzeme olarak sınıflandırılabilir. YKP'lerin kristallik derecesi malzemenin toplam hacmi içerisinde kristal fazın miktarını belirtmek için kullanılır ve yoğunlukla 10% ile 80% arasında değişir. UYMAPE'de gözlemlenen mikroyapısal morfolojilerden biri küresel mikro-yapıdır (spherulite). Küresel mikro-yapı radyal yönde yayılan kristal lameller ve onların arasında bulunan amorf bölgelerden oluşur. Lamellerden oluşan kristal yapı ve moleküler zincirlerden oluşan amorf yapının neticesinde UYMAPE iki-fazlı bir malzemedir. İki-fazlı yapı, YKP'lerde hem kristal

malzemelerde bulunan deformasyon mekanizmalarının, hem de amorf polimerlerde bulunan deformasyon mekanizmalarının gözlemlenmesine sebep olur. Örneğin UYMAPE'lerin kristal bölgelerinde elastik olmayan deformasyonun ana sebebi dislokasyonlar sonucu oluşan kristalografik kaymadır. Öte yandan, UYMAPE'lerin amorf fazı en çok lamelarası kayma ve lamelarası ayrılma şekillerinde deformasyona uğrar. Yukarıda belirtilen çeşitli şekil değiştirme mekanizmaları, makroskopik deformasyon sırasındaki yük düzeyine bağlı olarak birlikte ya da ayrı ayrı aktif hale gelebilirler. Amorf faz UYMAPE'lerin en yumuşak bölgesini oluşturduğundan, düşük seviyedeki dış yükler altında kristal lamellerden önce deforme olmaya başlar. Daha fazla deformasyonun sonucu olarak, amorf faz zincirleri yönlenmeye başlar ve kristal amorf arayüzlerinden kaynaklanan kısıtlamalar aktif hale gelir. Böylece, amorf fazdaki gerilmeler hızlıca yükselerek kristal fazdaki kesme gerilimi bileşeninin kristalografik plastik kaymayı başlatacak kritik bir seviyeye ulaşmasına yardımcı olur.

Yarı-kristal polimerlerin yapısını açıklayan iki temel modelden biri olan saçaklı misel, 1930'lu yıllarda geliştirilmiştir. Şekil 1(a)'da gösterildiği gibi, bu modele göre, katı polimerde kristal ve amorf bölgeler iki ayrı faz oluşturmaktadır. Polimer zincirleri birçok kristal ve amorf bölgeden geçer. Saçakların olduğu kısımlarda zincirler iç içe geçmiş durumda ve karmaşık bir konformasyondadır. Bu bölgeler amorf olup, polimere dışarıdan bir kuvvet uygulandığında ilk önce bu bölgeler uzama gösterir.

İkinci model ise Keller tarafından 1957 yılında önerilen ve halen de geçerli bir model olan katlanmış zincir (folded chain) modelidir (Keller, 1957). Şekil 1(b)'de gösterildiği gibi bu modelde kristal bölge katlanmış zincirlerin içinde bulunduğu, 100 Å civarında kalınlığı olan bir lamel içinde yer alır. Lamel polimer zincirlerinin birbiri üzerine katlanarak oluşturduğu, kristal özellik gösteren en küçük yapıya denir. Amorf bölgeler lameller arasında bulunur. Lamelin boyutları polimer cinsine ve kristallenme koşullarına göre değişir.

kristallografik plastik kayma sadece polimer zincirlerinin doğrultusunu içeren düzlemlerde gerçekleşir. Şekil 3(a)'da polietilen kristallerinin ortorombik birim hücresi ve polimer zincirleri boyunca mevcut olan güçlü kovalent bağlar görülmektedir. Ayrıca, kristal lamellerin yüzeyindeki moleküler zincirlerin katlanma yönleri de kayma düzlemlerine ek sınırlamalar getirir. Kristal lamellerde iki farklı tür kristallografik kayma gözlemlenir. Bunlar Şekil 3(b) ve (c)'de gösterildiği gibi (i) *zincir yönünde kayma (chain slip)* ve (ii) *enine kaymadır (transverse slip)*.



Şekil 3. (a) Polietilen kristal kafesinin ortorombik birim hücresi [8]. YKP'lerde gözlemlenen (b) polimer zincirine paralel yönde kayma (chain slip) ve (c) polimer zincirine dik yönde kayma (transverse slip) (Bartczak ve Galeski, 2010).

YKP'lerde deformasyon öncesinde var olan dislokasyonların miktarı bu malzemelerdeki küçük ölçekli plastik deformasyonun oluşması için yeterli düzeydedir. Ancak, kristal lamellerdeki orta ve büyük boyuttaki plastik deformasyonlar için yeni dislokasyonların yaratılması gerekmektedir. Bu nedenle, yeni dislokasyonların oluşmasına imkan verecek aktif bir mekanizmaya ihtiyaç vardır. Bu doğrultuda, kristal lamellerin yüzlerinden termal kaynaklı vida dislokasyonu emisyonu mekanizması öne sürülmüştür (Peterson, 1966). Daha sonra bu dislokasyon emisyonu mekanizması başka araştırmacılar tarafından geliştirilmiştir (Shadradke ve Guiu, 1976; Young, 1974). Bilindiği gibi YKP'lerin akma gerilimi lamel kalınlığına bağlı olarak artış gösterir (Brooks ve Mukhtar, 2000; Crist vd., 1989; Darras ve Seguela, 1993; Galeski, 2003). Kalınlığı 30 nm'den daha düşük olan lameller için vida dislokasyonu emisyonu modeli, akma geriliminin lamel kalınlığıyla arasındaki ilişkiyi başarıyla tahmin etse de ne yazık ki daha kalın lameller için bu model deneysel bulgulardan daha yüksek akma gerilimi tahminlerinde bulunur. Deneysel gözlemler akma geriliminin lamel kalınlığı yaklaşık 30 nm ulaşıncaya kadar arttığını ve daha sonra doyuma ulaşmaya başladığını göstermiştir (Kazmierczak vd., 2005). Yakın dönemde lamel kalınlığına bağlı

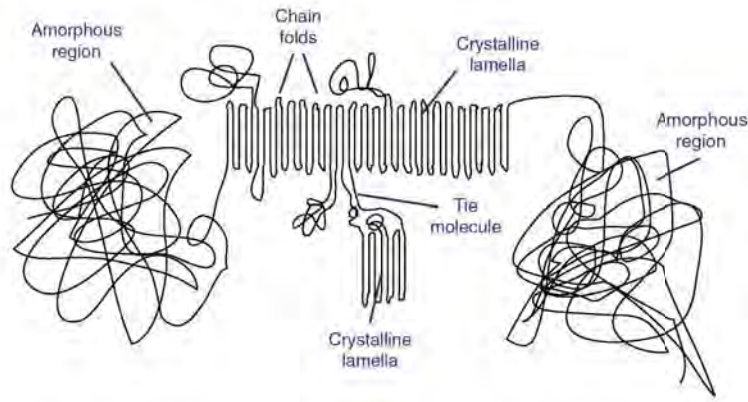
olmayan iki yeni dislokasyon emisyonu mekanizması önerilmiştir (Argon vd., 2005). Bu yeni önerilen mekanizmaların lamel kalınlığı 40 nm'den daha fazla olan YKP'ler için deneyler Kazmierczak vd. (2005) ile daha uyumlu sonuçlar verdiği görülmüştür.

YKP'lerin amorf fazında literatürde üzerinde anlaşılmış olan üç farklı deformasyon mekanizmasına rastlanır. Bunlar (i) *lamelarası kayma (interlamellar shear)*, (ii) *lamelarası ayrılma (interlamellar separation)* ve (iii) *yığın dönme (stack rotation)* mekanizmalarıdır. *Lamelarası kayma*, iki lamelin birbirine paralel fakat zıt yönlerde yer değiştirmesine bağlı olarak bu iki lamelin arasındaki amorf bölgenin deformasyona uğramasına verilen isimdir. Bu mekanizma, camlaşmaya geçiş sıcaklığından yüksek sıcaklıklarda YKP'lerin en yumuşak deformasyon tipini oluşturur, ve bu nedenle kolayca aktive edilir. Makroskopik deformasyonun geri kazanılabilen elastik kısmı neredeyse tamamen lamelarası kayma nedeniyle oluşan deformasyondan kaynaklanır. YKP'lerin amorf fazı camlaşmaya geçiş sıcaklığından yüksek sıcaklıklarda kauçuksu durumda bulunduğu için, amorf faz kauçuk gibi davranır. Bu nedenle, dolaşık durumdaki zincirler (entangled chains), malzemeye etki eden yüklerin kaldırılmasından sonra malzemenin deformasyona uğramamış ilk haline gelmesine yardım edecek kuvveti sağlarlar. İkinci mekanizma, *lamelarası ayrılma*, lamellerin yüzeylerine dik yönde etki eden çekme kuvvetlerinin sonucunda oluşur. Son mekanizma, *yığın dönme*, ise yumuşak amorf faz içine gömülü kristal lamellerin dönmesinden oluşur. Yığın dönmeler önemli miktarda deformasyon yaratmazlar, ancak, makroskopik şekil değiştirmelerin iki faza uyumlu bir şekilde dağılmasına yardımcı olurlar.

Yukarıda bahsedilen çeşitli deformasyon mekanizmaları makroskopik deformasyon düzeyine bağlı olarak tek başlarına ya da bir kaç birliktedir aktif olabilir. Amorf faz YKP'lerin en yumuşak bölgesini oluşturduğundan, düşük yükler altında kristal lamellerden önce amorf bölgeler deformasyona uğrar. Daha fazla deformasyon sonucu olarak, amorf fazdaki zincirler yönlenmeye başlar (orientation of chains) ve kristal ve amorf bölgelerin birbirlerine bağlandıkları arayüzlerden kaynaklanan kısıtlamalar aktif hale gelir. Böylece, amorf fazdaki gerilmeler hızlıca yükselerek kristal fazdaki kesme gerilimi bileşeninin kristalografik plastik kaymayı başlatacak kritik bir seviyeye ulaşmasını sağlar. Daha yüksek seviyedeki makroskopik deformasyonlar iki faz tarafından da karşılanır.

Yukarıda bahsedilen mikroyapısal özellikler ve deformasyon mekanizmaları genel bir çerçevede bütün YKP'ler için anlatılmıştır. Çok yakın zamanda yayınlanmış bir derleme makalesinde (Bartczak ve Galeski, 2010) belirtildiği gibi YKP'lerin karmaşık, çok ölçekli ve hiyerarşik yapılarından dolayı bu malzemelerdeki elastik ve elastik olmayan deformasyonlar da oldukça kompleks ve çok aşamalı şekilde gerçekleşir.

UYMAPE son derece uzun zincir yapısına sahip ve molekül ağırlığı milyonlar düzeyinde bir YKP'dir. UYMAPE'in molekül zinciri 200,000 etilen biriminden (C_2H_4) oluşabilir. Bir başka deyişle, UYMAPE'in molekül zincirindeki karbon atomu sayısı 400,000'e kadar ulaşabilir (Kurtz, 2009) Kendisi de bir YKP olduğundan, yukarıda genel çerçevede YKP'ler için bahsedilen mikroyapılar ve deformasyon mekanizmaları doğal olarak UYMAPE'de de gözlemlenir. UYMAPE'de gözlemlenebilen morfolojik yapılardan biri şematik olarak Şekil 4'te gösterilmiştir. Diğer YKP'ler gibi UYMAPE mikro-yapısında uzun dolaşmış molekül zincirlerinden oluşan amorf bölgeler ve katlanmış molekül zincirlerinden oluşan kristal lameller bulunur. Şekil 4'te gösterildiği gibi bağ molekülleri bir lamelden başlayıp amorf bölgeden geçerek diğer bir lamele ulaşmak suretiyle lamelleri birbirine bağlar. Bağ moleküller ve amorf fazda bulunan dolaşmış molekül zincirleri bu malzemenin mükemmel mekanik özelliklere sahip olmasını sağlar. Kristal lamel mikroskobik boyutlarda olduğundan ve çıplak gözle görülemez. Kristal lamel ışığı parçalara ayırarak UYMAPE'in oda sıcaklığı beyaz, opak bir görünüm almasını sağlar. UYMAPE Şekil 4'te şematik olarak gösterilen morfolojik yapıda bulunabileceği gibi (Kurtz, 2009; Farrar ve Brain, 1997; Sakurai vd., 1996), küresel mikroyapılardan da oluşabilir (Kurtz, 2009; Wang vd., 2009).



Şekil 4. UYMAPE'de bulunan morfolojik yapılar (Kurtz, 2009).

Son yıllarda, teknolojik ve endüstriyel önemlerinden dolayı yarı-kristal polimerlere gittikçe artan bir ilgi olmuş ve bu artışa paralel olarak, yapılan deneysel ve modelleme araştırmaları da gün geçtikçe artmıştır. Bu bağlamda, YKP'ler hakkında çok sayıda derleme makalesi yayınlanmıştır (Lin ve Argon, 1994; Bartczak ve Galeski, 2010; Galeski, 2003; Oleinik, 2003). YKP'lerin mekanik davranışını modellemek için sonlu elemanlar yöntemine entegre edilmeye uygun bir çok model geliştirilmiştir. Geliştirilen bu modellerin büyük bir kısmı (Ayoub vd., 2010; Düşünceli ve Çolak, 2006; Lee vd., 1993; Nikolov vd., 2002; Sedighiamiri vd., 2010; Van Dommelen vd. 2003; Uchida ve Tada, 2010) yüksek yoğunluklu polietilenler (YYPE)

içindir. Diğer YKP'lerden PET (Ahzi vd., 1994; Guenguen vd., 2010), naylon-6 (Hsia vd., 1994), iPP (Drozdov ve Christiansen, 2003) ve poliamit (Sai vd., 2011; Zeng vd., 2010) için de geliştirilmiş sınırlı sayıda model mevcuttur. Fakat geliştirilen bu modellerin büyük bir çoğunluğu ya tamamen fenomenolojik ya da yarı-fenomenolojiktir. Temel olarak sadece YYPE için geliştirilmiş mikromekaniksel motivasyonu olan çok ölçekli malzeme modelleri (Ahzi vd., 1994; Lee vd., 1993; Nikolov vd., 2002; Nikolov vd., 2006; Sedighiamiri vd., 2010; Van Dommelen vd., 2003) mevcuttur. Bu modellerde kristal lameller için kristallografik kayma mekanizmalarını göz önüne alan kristal plastisitesi kullanılmıştır. Klasik kristal plastisite teorisinde (Rice, 1971) modellenecek malzemeye ilgili kristallografik bilgilere ihtiyaç vardır. Bu bilgiler kayma sistemleri ile ilgili olan kayma düzlemi, kayma yönü ve kritik kesme gerilimi bileşenidir. Bu bilgiler çoğunlukla yüzey merkezli küp kafes ve hacim merkezli küp kafes yapılara sahip olan metal kristaller için uzunca bir süreden beri bilinmektedir. Metal kristallerden farklı olarak YKP malzemelerde kristal faz ortorombik, monoklinik veya triklinik kafesler gibi düşük simetrik kafes yapılarına sahiptir. Ayrıca, YKP'lerde polimer zincirlerinin uzama yeteneğinden yoksunluğundan kaynaklanan ve kayma sistemlerini etkileyen kinematik kısıtlamalar mevcuttur. Bu nedenlerden dolayı, YKP'lerde metal kristallerdeki gibi en yoğun düzlem kayma düzlemi, en yoğun yön de kayma yönü değildir. Kayma sistemleri ile ilgili bu bilgileri saptamak için naylon-6 (Lin ve Argon, 1994a) ve YYPE (Bartczak ve Argon, 1992) üzerinde deneysel çalışmalar yürütülmüştür. Diğer bir yandan, YKP'lerin amorf fazının modellenmesi için de değişik yaklaşımlarda bulunulmuştur. Amorf fazın çoğunlukla kauçuk tipi davrandığı düşünülmüş ve 8-zincir (Arruda ve Boyce, 1993) modelini baz alan viskoelastik (Nikolov, 2002) ya da viskoplastik (Lee vd., 1993; Nikolov vd., 2006; Van Dommelen, 2003) modeller kullanılmıştır.

YYPE için geliştirilmiş mikromekaniksel motivasyonu olan çok ölçekli malzeme modellerinde homojenleştirme metodu olarak değişik yöntemler denenmiştir. Bilindiği gibi makroskopik ve mikroskopik deformasyonların eşitliğine literatürde genellikle Taylor-tipi homojenleştirme metodu denir ve bu metodun sonuçları çok sert davranış gösterirler. Matematiksel olarak da Taylor-tipi homojenleştirme metodu homojenleştirme teorisinde üst sınır oluşturur. Diğer yandan, makroskopik ve mikroskopik gerilmelerin eşitliği Sachs-tipi homojenleştirme metoduna karşılık gelir ve bu metodun sonucunda malzemenin makroskopik davranışı çok yumuşak olur. Matematiksel olarak Sachs-tipi homojenleştirme metodu homojenleştirme teorisinde alt sınır oluşturur. Taylor-tipi homojenleştirme metodunun yüzey merkezli küp kafes yapılar gibi çok simetrik olan kristallerde başarılı sonuçlar verdiği bilinmektedir. Fakat, YKP'ler gibi düşük simetrik bir kafes yapısına sahip olan kristallerde Taylor-tipi

homojenleştirme yöntemi başarılı değildir. Bu sebeple, Parks ve Ahzi (1990)'de klasik Taylor metodu değiştirilerek kısıtlandırılmış melez bir yöntem (constrained hybrid model) geliştirilmiş ve YYPE'in kristal fazındaki doku değişimi (texture evolution) başarılı bir şekilde modellenmiştir. Bu çalışmada YYPE'deki amorf faz tamamen ihmal edilmiştir. Daha sonra bu model geliştirilerek Lee vd. (1995) naylon-6, PET ve iPP'in modellenmesinde kullanılmıştır Ahzi vd. (1994). Diğer bir çalışmada Lee vd. (1993) Sachs-tipi homojenleştirme metodu kullanılarak YYPE'deki plastik deformasyon ve doku değişimi incelenmiştir. Bu çalışmada YYPE'in kristal ve amorf bölgelerden oluşan iki fazlı yapısı dikkate alınmış, ancak her iki fazdaki elastik deformasyonlar ihmal edilmiştir. Daha sonra önerilen bir başka çok ölçekli modelde (Dommelen vd., 2003), YYPE elastoviskoplastik olarak davranan iki fazlı katmanlı bir kompozit olarak düşünülmüştür. Bu modelde homojenleştirilmiş deformasyon ve gerilim değerleri melez bir etkileşim modeli ile elde edilmiştir. Ayrıca, hasar mekaniği ile viskoplastisitenin birleştirildiği bağlaşik bir model (Alvarado-Contreras vd., 2010)'de geliştirilmiştir. Hasarın bağ moleküllerinin yoğunluğunu ile karakterize edildiği ve sadece amorf fazı etkilediği bu çalışmada YYPE'in mekanik davranışı ve doku değişimi incelenmiştir. Geliştirilen diğer bir modelde (Zeng vd., 2010) ise YKP'lerdeki mikroyapısal morfoloji küçük, orta ölçekli ve büyük amorf bölge şeklinde üç gruba ayrılarak, YYPE ve poliamit malzemelerin tek-eksenli ve iki-eksenli yükler altındaki davranışı araştırılmıştır. Polimer zincir eksenlerinin dağılımını karakterize etmek için sürekli bir yönelim dağılım fonksiyonunun (continuous orientation distribution function) kullanıldığı bir başka modelde (Yang ve Chen, 2001) ise sadece kristal faz dikkate alınarak malzemedeki kristallografik doku değişimi incelenmiştir. Daha önce bahsedilen iki-fazlı yaklaşımlarından farklı olarak, YKP'lerin homojenleştirilmiş elastik malzeme parametrelerini tahmin etmek için üç fazlı modeller (Gueguen, 2010; Sedighiamiri, 2010) de geliştirilmiştir. Bu modellerde kristal ve amorf fazlara ek olarak, amorf ve kristal fazların arasında bulunan bir arayüzey bölgesinin varlığı kabul edildi. Bu üç-fazlı yaklaşımla PET (Gueguen, 2010) ve YYPE (Sedighiamiri, 2010) gibi YKP'ler modellenmiştir.

UYMAPE hakkında yakın zamanda basılmış derleme makaleler (Fisher vd., 2009) ve bir el kitabı (Kurtz, 2009) mevcuttur. Fakat bu derleme makalelerde çoğunlukla UYMAPE'in diz ve kalça implantlarındaki kullanımı ve bu operasyonlardaki klinik seyri detaylı bir şekilde tartışılmış, sadece Sobieraj ve Rimnac (2009)'da UYMAPE'nin mekaniksel özelliklerine kısaca değinilmiştir. UYMAPE ile ilgili en detaylı kaynak olan el kitabında (Kurtz, 2009) bu konulara ek olarak UYMAPE'in kullanıldığı diğer eklem protezleri (omurga, dirsek, omuz ve bilek), UYMAPE'in sentezi, fiziksel, kimyasal ve mekanik özellikleri, sürtünme, yorulma ve

göçme davranışları ayrıntılı bir şekilde anlatılmıştır. Yaklaşık 550 sayfalık bu el kitabında UYMAPE'in modellenmesine ve sayısal benzetimine 14 sayfalık son bölümde kısaca değinilmiştir. Bu el kitabına ek olarak UYMAPE'ler ile ilgili geliştirilmiş modellere örnek olarak (Bergström vd., 2002; Bergström vd., 2003; Bergström vd., 2004; Avanzini, 2008; Li vd., 2009; Sweeney vd., 2011; Guedes vd., 2011) verilebilir.

Bu çalışmaların çoğu olarak (Bergström vd., 2002; Bergström vd., 2003; Bergström vd., 2004) aynı grup tarafından geliştirilmiş olan oldukça benzer modelleri içerir. Geliştirilen bu modeller çoğunlukla fenomenolojiktir (Avanzini, 2008; Li vd., 2009; Sweeney vd., 2011; Guedes vd., 2011) ya da çok kısıtlı bir mikromekaniksel motivasyonları (Bergström vd., 2002; Bergström vd., 2003; Bergström vd., 2004) vardır. Gerçek anlamda çok ölçekli bir UYMAPE modeli henüz geliştirilmemiştir.

Implant sistemlerin sonlu elemanlar metodu ile sayısal benzetimleri literatürde mevcuttur (Fouad, 2011; Halloran vd., 2005; Hopkins vd., 2010). Fakat bu çalışmalarda UYMAPE için kullanılan malzeme modelleri oldukça basittir. Yakın zamanda yapılan bir çalışmada Katti (2004) işaret edildiği gibi UYMAPE'in nano, mikro ve meso yapılarını göz önüne alan çok ölçekli modellerin geliştirilmesine ve bu modelleri kullanarak yapılacak sonlu eleman simülasyonlarına kesinlikle ihtiyaç vardır. Yukarıdaki literatür özetinden görüldüğü üzere YYPE'den farklı olarak UYMAPE için geliştirilmiş modeller oldukça sınırlıdır, ve mevcut modellerin hemen hepsi fenomenolojiktir. Ayrıca bu modellerde kalça ve diz protezi simülasyonlarında büyük önemi olabilecek bağlaşıklık hasar-plastisite tarzı yaklaşımlar yoktur. Literatürde YKP'ler için geliştirilmiş bağlaşıklık hasar-plastisite yaklaşımı olan bir tek modele (Alvarado ve Contrares, 2010) rastlanmıştır ve bu model de YYPE için geliştirilmiştir.

2.2. Diz İmplantlarındaki UYMAPE Bileşenler, Performansları ve Hasar Tipleri

2.2.1. Diz İmplantlarının Yapısı

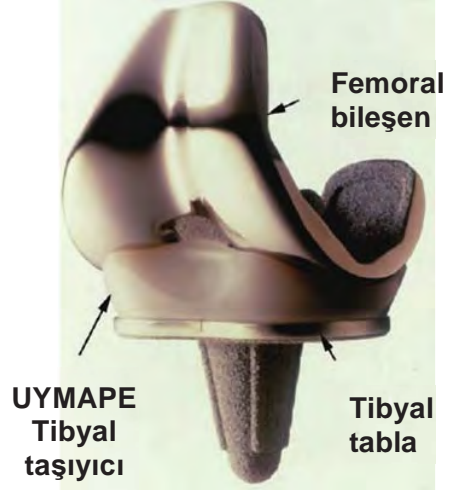
Diz implant ameliyatları, kalça implantları ile birlikte en sık uygulanan implant türlerindedir. Diz implantları genel olarak başarılı operasyonlar olup 10 yıldan uzun süreli kullanım oranı %90'dır. Ancak, UYMAPE bileşende oluşan aşınma ve yorulmadan kaynaklı hasarlar yüzünden implantın kullanım ömrü sınırlanmaktadır. Ortalama olarak 15 sene kullanım ömürleri bulunmaktadır.

Diz, vücuttaki en karmaşık eklemlerden biridir. Diz eklemi, 140°'ye kadar bükülebilir, yük altında değil iken 5 mm kadar uzar, ve eklem yüzeylerinin birbirlerine göre karmaşık dönme ve kayma hareketleri yapmasına izin verir. Öyle ki, dizin izin verdiği tüm dönme ve kayma hareketlerini modelleyebilmek için 6 adet serbestlik derecesi kullanılmalıdır. UYMAPE, diz implantlarında 1960'lı yılların sonlarında kullanılmaya başlanmıştır. Daha önce, Şekil 1(a)'da

görülen mesnetli protez tasarımları kullanılmıştır. 1960'lı yıllarda kullanılan protezler Şekil 1(a)'da görüldüğü üzere bir mesnete sahip olup kaval ve uyluk kemiklerinin temas yüzeyindeki dönme hareketine izin vermemektedir. Diz ekleminin hareketini fazlasıyla kısıtlayan bu tasarımlarda implant ve kemik bağlantı bölgelerinde yüksek kuvvetler oluşmakta, bunun neticesinde ise implant zamanla gevşemektedir. Yüksek komplikasyon oranları ve düşük kullanım ömürleri sebebiyle bu tasarımlar günümüzde tercih edilmemektedir.



(a) (Museum of Healthcare at Kingston, 2014)

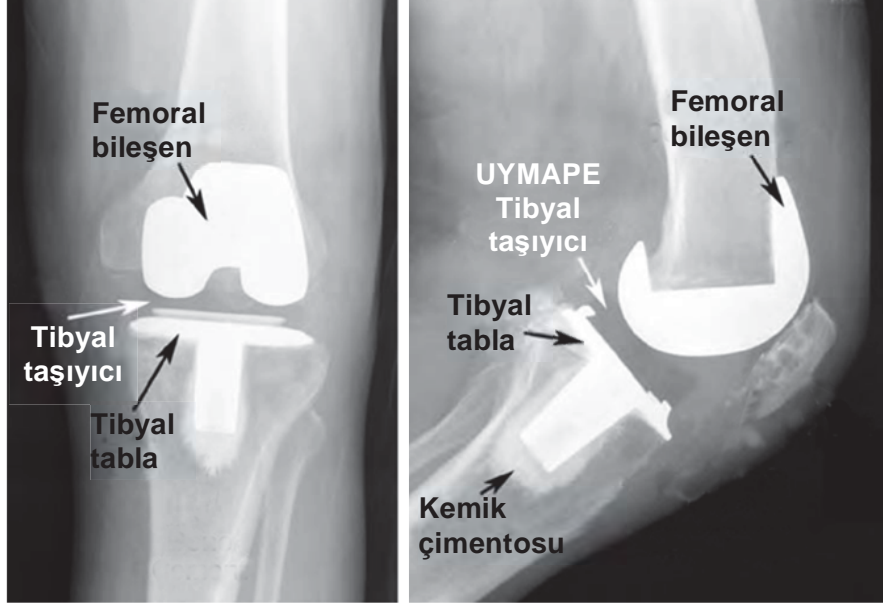


(b) (Kurtz vd., 2004)

Şekil 1. (a) 1960'lı yıllarda kullanılan (b) modern implant tasarımları

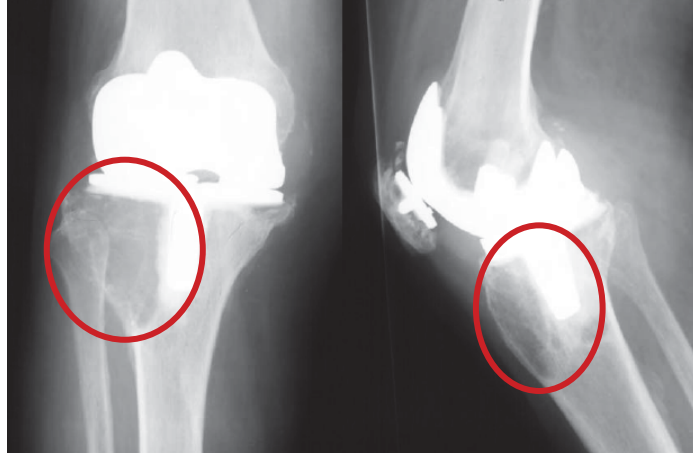
UYMAPE'lerin diz implantlarında kullanımının başlaması ile, 1970'lerde implant tasarımları hızla değişim ve gelişim göstermiştir. Gelişim implantların hareket kabiliyetlerini artırmaya doğrultusundadır. Günümüzdeki modern implant tasarımları Şekil 1(b)'deki gibidir. Operasyon ile implant takılmış bir diz ekleminin görünümü, Şekil 2'deki gibidir. Modern tasarımlarda uyluk kemiği ve kaval kemiğinin işlev görmez duruma gelen kısımları alınarak, yerlerine genellikle kobalt – krom 'dan imale edilen, sırasıyla femoral bileşen ve tibyal bileşen olarak adlandırılan metal parçalar kemik çimentosu ile yapıştırılmaktadır. İki metal bileşenin arasına ise UYMAPE'den imal edilen tibyal taşıyıcı (tibial insert) parça konmaktadır. Tibyal taşıyıcı, kaval kemiğini kaplayan tibyal tablaya genelde yapışıktır, ancak tasarıma göre, yapıştırılmayarak serbest de bırakılabilir. Uyluk kemiğini kaplayan femoral bileşen ile tibyal taşıyıcı arasında ise herhangi bir bağ bulunmaz. Tüm parçaların birbirlerinden ayrılmadan hareket etmesini diz ekleminin bağ dokuları sağlar. Modern tasarımlar, günlük kullanımda diz ekleminin yapabileceği hareketleri fazla kısıtlamaması ve ameliyat esnasında yapılabilecek hizalama hatalarının UYMAPE'nin yumuşaklığı ve gerektiğinde aşınabilmesinden ötürü kolay tolerans gösterebilmesi sebebiyle avantajlıdır. Diğer bir yandan tibyal taşıyıcının uzun yıllar boyunca kullanılabilmesi için, aşınma ve darbelere karşı yüksek

dayanım gösterebilmesi gerekmektedir. UYMAPE'nin karakteristik özelliklerinden olan yüksek tokluk, düşük sürtünme katsayısı ve kimyasal etkilere karşı dayanıklılık, UYMAPE'nin darbe ve aşınmalara karşı dirençli ve biyo-uyumlu olmasını sağlar. Bu sebeple UYMAPE modern tasarımlarda tibyal taşıyıcı elemanda kullanımı en çok tercih edilen malzemedir.



Şekil 2. İmplant uygulanmış diz ekleminin, diz düz ve bükülü durumda iken görünümü (UYMAPE parça röntgende saydam olarak görülmektedir) (Kurtz vd., 2004)

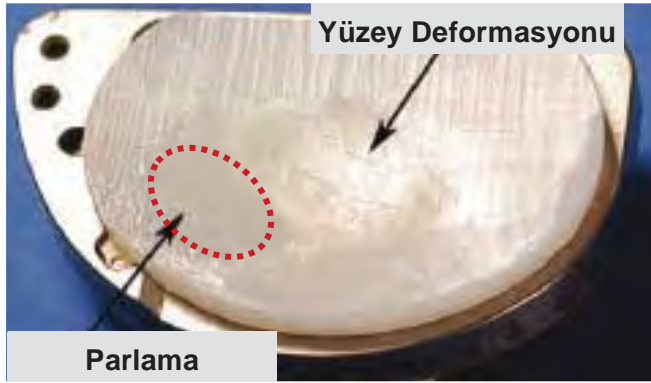
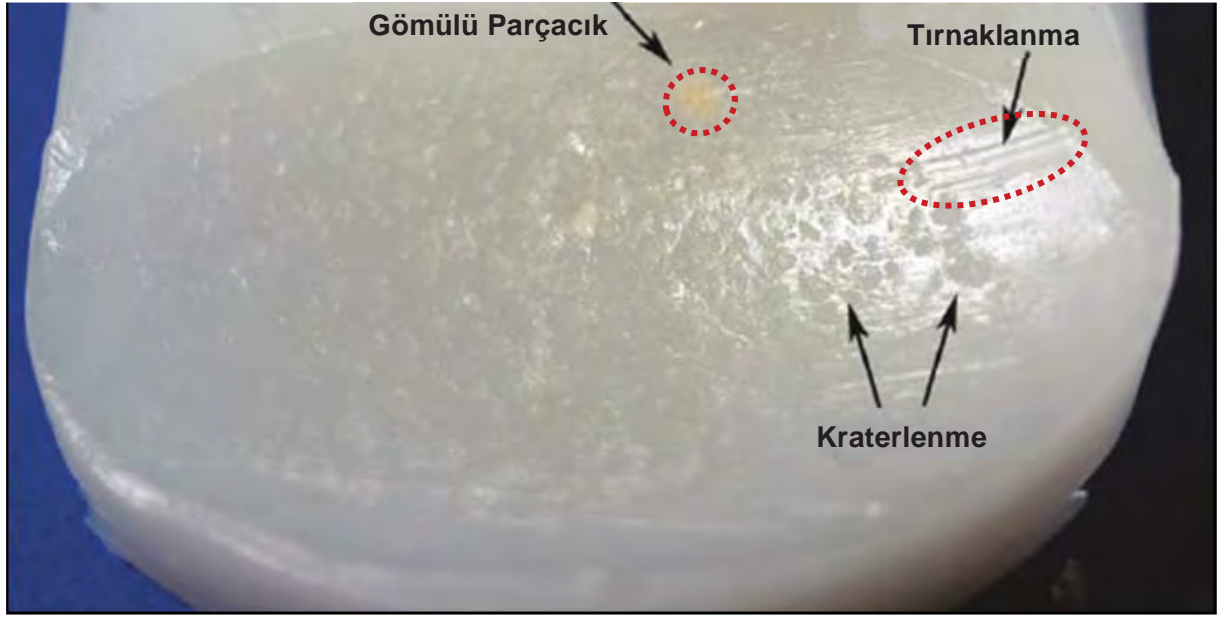
Diz anatomisinden kaynaklanan kısıtlamalardan ötürü, kullanılacak tibyal taşıyıcının kalınlığı sınırlıdır. UYMAPE her ne kadar aşınmaya karşı dayanıklı bir malzeme ise de tamamen aşınmaz değildir. Ayrıca, UYMAPE'nin aşınması ile ortaya çıkan partiküller kemik ile etkileşime girmeye elverişli büyüklüktedir. Bu etkileşim sonucunda kemik erimesi (periprosthetic osteolysis) görülmektedir (Ingham ve Fisher, 2000). Şekil 3'teki röntgende, implantlı bir dizde UYMAPE aşınmasına bağlı oluşan kemik erimesi bölgeleri görülmektedir. Kemik erimesi, tibyal ve femoral bileşenlerin kemik ile olan bağlarını zayıflatarak, implant gevşemesine sebep olmaktadır. UYMAPE'den imal edilen tibyal taşıyıcının fazla incelmemesi ve yan etkiler ortaya çıkarabilecek UYMAPE partikül miktarının kabul edilebilir seviyelerde kalması için aşınmaya karşı olan direncin mümkün olduğunca artırılması gerekmektedir.



Şekil 3. İmplantlı dizde UYMAPE aşınmasına bağlı olarak ortaya çıkan kemik erimesi (Kurtz vd., 2004)

2.2.2. Tibyal Taşıyıcıda Görülen Belli Başlı Yüzey Hasarları

Şekil 4'te tibyal taşıyıcıda görülen yüzey hasarlarının bir kısmı verilmiştir. Bu hasarlar 7 grupta toplanabilir (Hood vd., 1983): (i) Kraterlenme (pitting) UYMAPE yüzeyinde 2-3 mm çapında 1-2 mm derinliğinde çukurların oluşmasıdır. Yorulmaya bağlı aşınmadan kaynaklanan bu hasar türünde oluşan aşınma parçacıklarının boyutları kemikle etkileşime girmeyecek kadar büyük olduğundan, bu hasar türü görece önemsiz sayılabilir. (ii) Gömülü parçacık (embedded debris) türü yüzey hasarında kemik ya da metal parçacıklar UYMAPE içine gömülür. Gömülü parçacıklar, tibyal taşıyıcı üzerine basan metal femoral bileşenin aşınmasını hızlandırır. Bu durum, aşınmış yüzeyli femoral bileşen, tibyal taşıyıcının daha hızlı aşınmasına sebep olur. (iii) Tırnaklanma (scratching), aşınmaya bağlı bir hasar türü olup, femoral bileşendeki pürüzlerin ya da üçüncü bir objenin UYMAPE yüzeyini çizerek oluşturduğu sıyrıklardır. (iv) Tabaka halinde ayrılma (delamination), yorulmaya bağlı aşınmadan kaynaklanır ve UYMAPE yüzeyinin tabaka halinde sıyrılmasıdır. Eğer tibyal taşıyıcı yeterince kalınsa işlev görmeye devam eder, inceyse ya da oksidasyon sonucu sertleşmiş ise tibyal taşıyıcı tamamen işlev görmez hale gelebilir. (v) Yüzey deformasyonu (surface deformation) UYMAPE yüzeyinin plastik deformasyonudur. (vi) Parlama (burnishing) aşınma ve yapışmaya bağlı bir hasar türü olup, UYMAPE yüzeyinin zımparalanarak parlamasıdır. Bu hasar türü sonucu oluşan aşınma parçacıkları çok küçük boyutlu olup kemik ile etkileşime girme potansiyeline sahiptir. (vii) Yenme (abrasion), aşınmaya bağlı bir hasar türü olup, UYMAPE yüzeyinin ufalanarak yer yer aşınmasıdır.



Şekil 4. Tibyal bileşende görülen yüzey hasarları (Kurtz vd., 2004)

2.2.3. Tibyal Taşıyıcının Aşınma Direncinin Artırılması İçin Kullanılan Teknikler

Tibyal taşıyıcının aşınmasını azaltmak için kullanılan teknikler çapraz bağlama (X-link) tekniği, implant geometrisinde yapılan değişiklikler ve implantın yüzey dokusundaki değişiklikler olmak üzere üç gruba ayrılabilir.

Çapraz Bağlama Tekniği

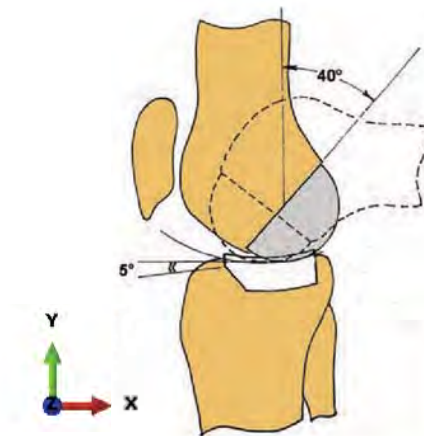
Tibyal taşıyıcının aşınmasını azaltmak için kullanılan ilk teknik, UYMAPE'nin yapısını değiştiren çapraz bağlama (X-link) tekniğidir. UYMAPE'nin belirli dozda radyasyona maruz bırakıldığı bu teknik özellikle UYMAPE'nin amorf fazı üzerinde etkilidir. UYMAPE'nin maruz kaldığı radyasyon enerjisi sayesinde, birbirlerine yakın olan zincirler arasında güçlü kovalent bağlar oluşmaktadır. Bu yöntem ile UYMAPE'nin aşınma direnci ciddi miktarda artmaktadır. Öyle ki, 100kGy'lik radyasyon dozu neticesinde kalça protezlerinde kullanılan UYMAPE parçadaki aşınmanın %90 oranında azaldığı, kalça simülatörü deneylerinde gözlenmiştir.

(Kurtz, 2004) . Ancak X-link tekniđi ile UYMAPE'nin snekliđi azalmakta, malzeme daha kırılgan olmaktadır. Bu sebeple X-link tekniđi, diz gibi yksek arpma direnci gerektiren blgeler yerine, kala gibi basma yzeylerinin daha geniř olduđu ve bu sebeple darbe direncinin daha az nemli olduđu blgelerde kullanılmaktadır. X-link tekniđinin bir diđer dezavantajı verilen radyasyon sebebiyle, UYMAPE ierisinde serbest radikaller oluřması ve bylece UYMAPE'nin oksijenle reaksiyona girme hızının artarak, UYMAPE'nin kimyasal yapısının bozulma hızı artmasıdır. X-link tekniđi zerindeki arařtırmalar devam etmekte olup, sneklik azalmasına karřı ısıl iřlem uygulanmasının, serbest radikal oluřumuna karřı UYMAPE yapısına E vitamini gibi biyo-uyumlu stabilizatrler eklenmesinin faydalı olduđu tartıřılmaktadır.

İmplant Geometrisinde Yapılan Deđiřiklikler

UYMAPE'nin aşınmasını azaltmak iin kullanılan ikinci teknik, implant geometrisinde yapılan deđiřikliklerdir. Bu deđiřiklikler arasında, tibyal tabla ve tibyal tařıyıcı arasında bađ olması (fixed bearing) ya da olmaması (mobile bearing), ve tibyal tařıyıcı biiminin femoral bileřen ile daha uyumlu hale getirilmesi suretiyle yzey alanının artırılması sayılabilir.

Femoral bileřen tibyal tařıyıcı zerinde Őekil 5'te grldđ zere kayarken aynı zamanda yuvarlanma hareketi de yapar. Buna ek olarak y-ekseni etrafında dnme hareketi de yapabilir. Ayrıca kayma ve dnme ynleri dizin hareketine ve hareketin evresine gre deđiřiklik gsterir. Bu sebeple tasarımlarda optimize edilebilecek farklı yerleřim noktaları bulunmaktadır ve yapılan deđiřiklikler bir aıdan olumlu iken bařka bir aıdan olumsuz olabilir. Patten vd. (2013) srklenme, yuvarlanma ve dnme hareketlerini UYMAPE zerinde hareket eden bir yarım krede belirli kombinasyonlarla tekrarlayarak aşınma miktarlarını deneysel olarak lmřtr. Farklı hareketlerin birlikte uygulanmasının aşınma miktarı zerinde kayda deđer etkisi olduđunu bulan alıřmanın sonularına gre en baskın etki srklenmeden kaynaklanmaktadır.

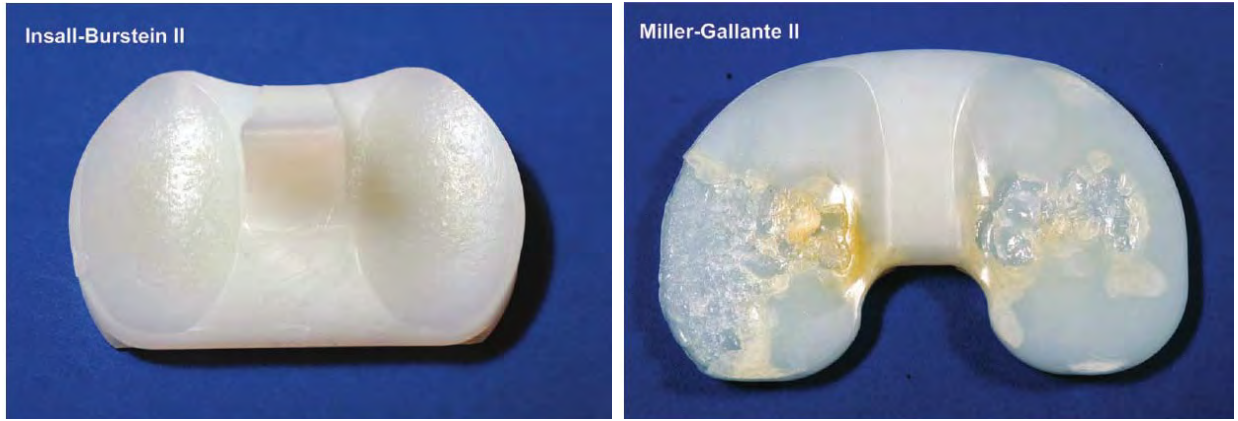


Őekil 5. Dizin dnerek kayma hareketi (Kurtz vd., 2004)

Temas gerilmelerinin düşürülmesi ile aşınmanın düşeceği teorik olarak bilinmektedir. Diz eklemine karmaşık hareketlere izin veren yapısından ötürü temasın gerçekleştiği yüzey alanı, örneğin bir kalça eklemine göre oldukça küçüktür. Hatta tibyal taşıyıcıda oluşan maksimum von Mises gerilmeleri UYMAPE'nin akma dayanımından da yüksektir. Ancak, klinik bulgular implantın uzun dönem başarısının sadece tibyal taşıyıcıdaki gerilim mertebesine bağlı olmadığını işaret etmektedir. Örneğin Şekil 6'da görülen, Miller-Gallante (MG) ve Insall-Burstein (IB) türü tibyal taşıyıcı tasarımlarının her ikisi de klinik olarak başarılı kabul edilmektedir (Berger vd., 2001; Thadani vd. 2000). Ancak MG tasarımında oluşan von Mises gerilmeleri IB tasarımından %20 daha yüksektir (Kurtz vd., 1998). Gerilim mertebeleri ile uyumlu olarak Şekil 6'da görüldüğü gibi IB tasarımında görece tehlikesiz sayılan kraterlenme türü aşınma sık görülürken, MG tasarımında önemli bir aşınma olan delaminasyon sık görülür.

MG türü tasarımda femoral bileşen ve tibyal taşıyıcı arasındaki temas alanı, tibyal taşıyıcının görece düz olması sebebiyle küçüktür ancak femoral bileşen tibyal taşıyıcı üzerinde serbestçe hareket edebilir. IB türü tasarımda ise tibyal taşıyıcıda bulunan kavisler sebebiyle temas yüzey büyük iken, femoral bileşenin hareketi bu kavislerden ötürü daha kısıtlıdır. Sonuç olarak MG türü tasarımda hareket serbestliğinden ötürü, implant gevşemesi nadir görülürken (Berger vd., 2001), IB türü tasarımda ise temas gerilmelerinin düşüklüğünden ötürü tibyal taşıyıcı aşınması seyrek görülür (Thadani vd., 2000). IB türü tasarımların getirdiği hareket kısıtlamasının önüne geçmek için tibyal taşıyıcının tibyal tabla üzerinde serbestçe dönmesine izin veren tasarımlar (mobile bearing) önerilmektedir, ancak bu tasarımlar henüz geniş kabul görmemiştir.

Tasarımlardaki geometrik değişikliklerin uzun dönem performansında sağlayacağı iyileşmenin, diz hareketinin ve aşınma mekanizmasının karmaşıklığından ötürü sadece simülasyona dayalı olarak tahmin edilmesi güçtür. Ne var ki, UYMAPE'nin aşınma direncinin artırılması, zayıf yanı aşınma yatkınlığı olan tasarımlarda olumlu sonuç verebilir.



Şekil 6 Insall-Burstein ve Miller-Gallante türü tibyal taşıyıcılar (Kurtz vd., 2004)

Yüzey Dokusu Kullanılarak Tibyal Taşıyıcı Aşınma Direncinin Artırılması

Aşınmayı azaltmak için kullanılan üçüncü teknik UYMAPE yüzeyine bir doku kazandırmaktır. Temas yüzeylerinde küçük boyutlu çukur, ya da tümsek gibi mikro dokular oluşturmanın makine elemanlarının sürtünme katsayılarını ve aşınma miktarlarını azalttığı bilinmektedir (Kovalchenko vd., 2005). Bu tekniğin implant tasarımlarında kullanılabilirliği güncel araştırmaların konusudur. İmplant tasarımlarında yüzey dokusunun metal ya da tibyal taşıyıcı bileşene kazandırılmasının sürtünme katsayısı ve aşınma üzerindeki etkileri kuru ve yağlı durumlar için çalışılmaktadır. Yüzey dokusu kullanımının sürtünme katsayısını düşürdüğü ve yüzeydeki hasarı azalttığı belirli yük ve yükleme hızı mertebeleri için görülmekle birlikte, bu iyileşmenin sebepleri farklı mekanizmalara bağlanmaktadır.

Yüzey dokusu doğada ve insan yapımı nesnelere belirli özellikleri artırmak için kullanılmaktadır. Doğada gözlenen yüzey dokularına örnek olarak köpek balıklarının derilerinde bulunan çizgi biçimli çıkıntılarının su direncini azaltması verilebilir. İnsan yapımı nesnelere örnek olarak ise golf toplarının üzerindeki oyukların, topun aerodinamik özelliklerini iyileştirerek daha uzağa gidebilmesini sağlaması verilebilir. Diz ekleminde kullanılan UYMAPE'den imal edilen tibyal taşıyıcının aşınma direncini artırmak için de yüzey dokusu üzerinde çalışmalar yapılmaktadır. Cervantes vd. (2013) yağlı ortam koşulu için olan deneysel çalışmada UYMAPE yüzeyine açılan çukurların, 70 kg ağırlığında bir birey için tibyal taşıyıcının sürtünme katsayısını kayda değer miktarda azalttığını bulmuştur. Sürtünme katsayısındaki azalma, çukurların yağlayıcı sıvının yağ rezervuarı görevi görmesine ve çukurda bulunan sıvının yük taşımaya yardımcı basınç oluşturmasına bağlıdır. Zhang vd. (2013) mikro yüzey dokusunun, metal parçanın mı yoksa UYMAPE parçanın mı üzerinde yer almasının tribolojik performans açısından daha iyi olduğunu deneysel olarak araştırmıştır. Yağlamanın su ile sağlandığı çalışmada, mikro dokunun UYMAPE yüzeyinde bulunmasının

aşınma miktarını ve sürtünme katsayısını daha fazla düşürdüğü bulunmuştur. Ripoll vd. (2011) yüzey dokusunun UYMAPE parça üzerinde olduğu, titanyum malzeme ile kuru sürtünme durumunu sonlu elemanlar yöntemi aracılığıyla sayısal olarak çalışmıştır. Yüzey dokusunun sürtünme katsayısı üzerinde kayda değer bir etkisi olduğu bulunmuş, ancak; dokulu yüzeyin aşınabilirliğinin arttığı ve bu durumun önüne geçmek için çukurların UYMAPE'ye yakın elastik modülü olan katı bir malzeme ile doldurulabileceği gösterilmiştir. Kustandi vd. (2010) silikon nitrat küre ve UYMAPE arasındaki sürtünme katsayısının UYMAPE üzerine açılan hendek biçimli yüzey dokusu ile değişimini kuru sürtünme durumu için deneysel olarak incelemiştir. Sürtünme katsayısında ve aşınma direncinde iyileşme görüldüğü belirtilmiştir. Sawano vd. (2009) mikro dokuların metal yüzeyde bulunduğu ve yağlanmanın su ile sağlandığı durum için, UYMAPE'de oluşan aşınma miktarını deneysel olarak incelemiştir. Mikro doku kullanımının aşınmayı azalttığı belirtilerek, azalmanın sebebinin mikro çukurların metal yüzeyden kopan parçacıkları hapsederek, UYMAPE yüzeyde açılacak derin izlerin önlenmesi olduğu belirtilmiştir.

3. GEREÇ VE YÖNTEM

3.1. Amorf ve Kristal Fazlar İçin Malzeme Modellerinin Geliştirilmesi

Bu bölümde iki fazlı yapının homojenleştirilmesi başlıklı Bölüm 3.2'de kullanılmak üzere UYMAPE'nin amorf ve kristal fazları için uygun bulunan bünye denklemleri tanıtılmaktadır.

3.1.1. Amorf Faz İçin Malzeme Modelinin Geliştirilmesi

Bu projede geliştirilen malzeme modelinin eklem protezlerinin sayısal benzetiminde kullanılacak olmasına bağlı olarak UYMAPE'in camlaşmaya geçiş sıcaklığından ($T_g \approx -120^\circ\text{C}$) düşük derecelerdeki davranışı dikkate alınmamıştır. Bir başka deyişle, proje kapsamında geliştirilen modelde sadece UYMAPE'in amorf fazının kauçuksu davrandığı durumlar göz önüne alınmıştır. Proje önerisinde de belirtildiği gibi UYMAPE'in amorf fazı için afin olmayan mikro-küre modeli (Miehe vd., 2004) baz alındı. Bu model orijinal olarak kauçuksu polimerlerin elastik davranışlarının modellenmesi için geliştirilmiş olsa da, UYMAPE'in amorf fazının modellenmesinde kullanılmasında bir engel bulunmamaktadır. Çünkü UYMAPE'in amorf fazının mekanik davranışı geleneksel kauçuksu polimer malzemelerden farklı değildir. Projede mikro-küre modeli, FORTRAN programlama dilinde kodlanmış ABAQUS sonlu elemanlar yazılımı ile UMAT altprogramı aracılığıyla bütünleştirilmiştir. Kodlanan model aracılığıyla yukarıda adı geçen makalede verilen gerilim-gerinim eğrilerinin aynıları elde edilmiştir. Aşağıda ilk olarak afin olmayan mikro-küre modeli kısaca özetlenmiştir.

3.1.1.1 Afin Olmayan Mikro Küre Modeli

Bu model kauçuksu polimerler için geliştirilmiş, bir tek polimer zincirine etki eden topolojik kısıtlamaları dikkate alan, mikro-mekanik temellere dayalı ve afin olmayan bir malzeme modelidir. Model, ilk olarak *bir tek polimer zincirinin mekansal olarak kısıtlı bir ortamdaki mikro-mekaniksel davranışını* betimler. Bu davranış iki mikro-kinematik değişken aracılığıyla tanımlanır. Bu değişkenler şunlardır:

- i. zincirdeki gerinme λ ve
- ii. bu zinciri içeren mikro-tüpün kesitindeki büzülme ν

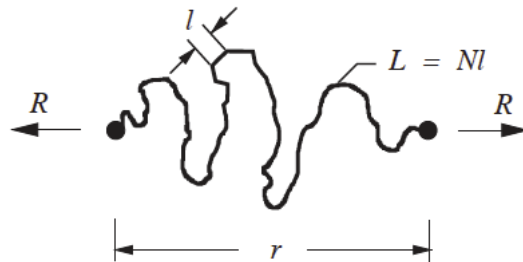
İkinci aşamada ise afin olmayan mikrodan makroya geçişi sağlayan özgün bir homojenleştirme yöntemi kullanılmaktadır. Buna bağlı olarak polimer ağının üç boyutlu davranışı her bir zincir için tanımlanan mikro-durum değişkenlerinin mikro-küre üzerinde homojenleştirilmesi ile elde edilir.

Tüp içerisindeki bir polimer zincirinin mekaniği

Tek bir polimer zincirinin istatistiksel olarak tanımlanmasında bir zincir, her birinin uzunluğu l olan N tane parçadan oluşacak şekilde idealleştirilir. Bunun neticesinde zincirin kontur (toplam) uzunluğu $L = N \cdot l$ olarak hesaplanır (James ve Guth, 1943). Serbest olan bir zincir Şekil 7'de gösterildiği gibi uzayda rastgele bir yöne sahiptir ve bu zinciri tanımlayan ana kinematik değişken zincir uçları arasındaki mesafe olan r 'dir. Şekil değişimine uğramamış serbest bir zincir için, zincirin bir ucunun diğer ucuna olan uzaklığının ortalama karekök değeri $r_0 = \sqrt{N} \cdot l$ olarak verilmiştir. Bu kinematik değişkenler yardımıyla gerinme λ ve görel gerinme λ_r aşağıdaki şekilde tanımlanır

$$\lambda = \frac{r}{r_0} \qquad \lambda_r = \frac{r}{L} = \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \qquad (1)$$

Zincirin iki ucu arasındaki mesafe r zincirin kontur uzunluğuna ulaştığı zaman görel gerinme de en yüksek değeri olan 1'e ulaşır.

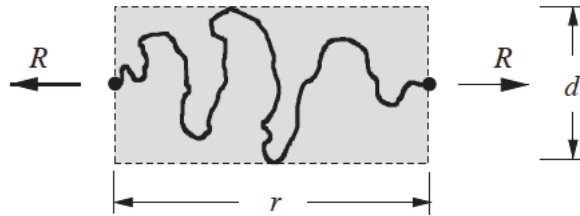


Şekil 7. Serbest bir polimer zincirinin geometrisi (Miehe vd. 2004). Zincirin bir ucunun diğer ucuna olan uzaklığı r , parça uzunluğu l , parça sayısı N ve kontur uzunluğu $L = N \cdot l$ 'dir.

Tek bir polimer zinciri normalde polimer ağında mevcut olan çapraz bağlar (crosslink) sebebiyle serbest şekilde hareket edemez. Çapraz bağların zincir hareketini kısıtlayıcı etkisi bulunmaktadır (Heinrich vd., 1988). Bu sebeple elastik kauçuk malzemeler için tüp modelleri geliştirilmiştir. UYMAPE'in amorf fazı için kullanılacak olan mikro-küre modeli (Miehe vd. 2004) bu kısıtlayıcı etkiyi dikkate almak için kinematik bir değişken tanımlar. Bu değişkeni tanımlamak için Şekil 8'de gösterildiği gibi polimer zincirinin çapı d olan düz bir tüp ile sınırlandırıldığı düşünülür. Şekil değişimine uğramamış polimer için bu tüpün çapının d_0 ile verildiğini kabul edersek, mikro-kinematik değişken olarak tüpün kesit alanındaki büzümeyi aşağıdaki şekilde tanımlarız

$$\nu = \left(\frac{d_0}{d} \right)^2. \quad (2)$$

Şekil değiştirmeden önceki tüp çapı d_0 mikro-küre modelinin bir malzeme parametresi olarak düşünülebilir.



Şekil 8. Çapı d olan bir tüp tarafından sınırlandırılan zincir geometrisi (Miehe vd., 2004).

Bir zincirin sahip olduğu serbest enerji ψ bu zincirin serbest hareketinden gelen kısım ψ_f ve tüp sınırlamasından gelen kısım ψ_c 'nin toplamı şeklinde ifade edilebilir.

$$\psi(\lambda, \nu) = \psi_f(\lambda) + \psi_c(\nu) \quad (3)$$

Bu enerjiler olasılık yoğunlukları p_f, p_c , Boltzmann sabiti k ve mutlak sıcaklık T cinsinden ifade edilir.

$$\psi_f(\lambda) = -kT \ln p_f(\lambda) \quad \psi_c(\nu) = -kT \ln p_c(\nu) \quad (4)$$

Mikro-kinematik deęişkenler olan λ ve ν 'nün eşlenik kuvvetleri olan aksenal kuvvet F_f ve yarıçapsal kuvvet F_c , kendilerine karşılık gelen serbest enerjiler ψ_f ve ψ_c 'nin türevleri şeklinde hesaplanır

$$F_f = \frac{d\psi_f(\lambda)}{d\lambda} \quad F_c = \frac{d\psi_c(\nu)}{d\nu} \quad (5)$$

Kuhn (Kuhn 1934) tarafından bulunmuş olan polimer zincirlerinin Gauss istatistięi, zincirin uçları arasındaki uzaklığın kontur boyundan çok kısa olduğunu varsayar. Bu durumda, küçük ve orta dereceli şekil deęiştirmeler için serbest zincirlerin olasılık yoğunluğu zincirdeki uzama λ cinsinden ifade edilebilir (Treloar, 1975; Kuhn, 1934)

$$p_f(\lambda) = p_0 \exp\left[-\frac{3}{2}\lambda^2\right] \quad (6)$$

Bu denklemden P_0 bir normalleştirme katsayısıdır. Bu sonuçların ışığında bir zincirin serbest hareketinin enerjisi

$$\psi_f(\lambda) = \frac{3}{2}kT\lambda^2 + \psi_0 \quad (7)$$

şeklinde λ 'nın ikinci dereceden fonksiyonu olarak ifade edilir. Bu ifadede ψ_0 bir sabittir. Bunun neticesinde zincirdeki aksenal kuvvet ile zincirin uzaması arasında (küçük ve orta dereceli şekil deęiştirmeler için) doğrusal bir ilişki bulunur.

$$F_f = 3kT\lambda \quad (8)$$

Gauss istatistięi, zincirlerin ancak sonlu miktarda uzayabileceğini dikkate almaz. Bu sebeple şekil deęiştirmelerin büyük olduğu durumlar için alternatif bir modele ihtiyaç vardır. Langevin istatistięini temel alan Langevin modeli olasılık yoğunluğu olarak aşağıdaki ifadeyi kullanır

$$p_f(\lambda) = p_0 \exp\left[-N\left(\lambda_r\beta + \ln\frac{\beta}{\sinh\beta}\right)\right] \quad (9)$$

Bu denklemden p_0 bir normalleştirme katsayısı, $\beta = L^{-1}(\lambda_r)$ ise Langevin fonksiyonunun

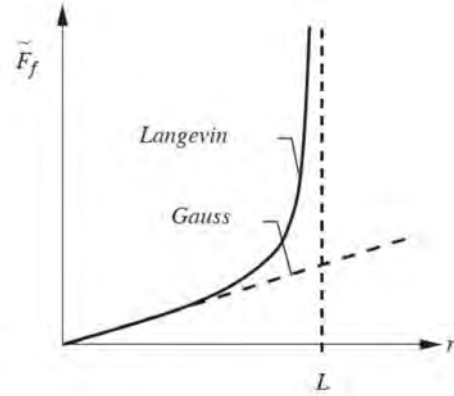
$$L(\beta) = \coth\beta - 1/\beta \quad (10)$$

tersidir. Langevin istatistięi kullanıldığında zaman bir zincirin serbest hareketinin enerjisi ve buna karşılık gelen zincir üzerindeki kuvvet aşağıdaki karmaşık ifadeler ile tanımlanır

$$\psi_f(\lambda) = NkT \left(\lambda_r L^{-1}(\lambda_r) + \ln \frac{L^{-1}(\lambda_r)}{\sinh L^{-1}(\lambda_r)} \right) + \psi_0 \quad (11)$$

$$F_f = kT \sqrt{N} L^{-1}(\lambda_r) \quad (12)$$

Denklem (12)'de belirtilen kuvvet - görelî gerinme ilişkisi doğrusal olmayan asimtotik bir davranış gösterir. Zincirin uçtan uca olan uzaklığının kontur boyuna ulaştığı ($r \rightarrow L$) durumda zincirdeki kuvvet F_f Şekil 9'da gösterildiği gibi sonsuza gider.



Şekil 9. Gauss ve Langevin istatistiklerini kullanarak hesaplanan aksenal kuvvet $\tilde{F}_f(r) = \partial \tilde{F}_f(r) / \partial r$ ile zincirin uçtan uca olan uzaklığı r (Miehe vd., 2004).

Ters Langevin fonksiyonu $L^{-1}(\lambda_r)$ 'nin hesaplanmasında kolaylık sağladığı için $L^{-1}(\lambda_r)$ genellikle Pade yakınlaştırmaları kullanılarak hesaplanır.

$$L^{-1}(\lambda_r) \approx \lambda_r (3 - \lambda_r^2) / (1 - \lambda_r^2) \quad (13)$$

Tüp kısıtlamasından kaynaklanan serbest enerjiyi hesaplamak için aşağıdaki olasılık yoğunluğu kullanılır (Doi ve Edwards, 1986)

$$p_c(v) = p_0 \exp \left[-\alpha \left(\frac{r_0}{d_0} \right)^2 v \right] \quad (14)$$

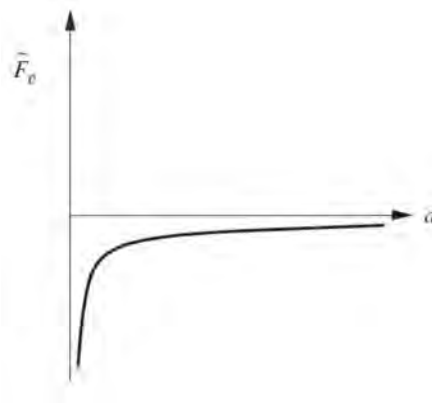
Bu denklemde P_0 bir normelleştirme katsayısıdır α ise sayısal bir katsayıdır. Yukarıdaki olasılık yoğunluğunun denklem (4)'e yerleştirilmesi sonucunda tüp sınırlamasından kaynaklanan enerji aşağıdaki şekilde bulunur

$$\psi_c(v) = \alpha kTN \left(\frac{l}{d_0} \right)^2 v + \psi_0 \quad (15)$$

Bu denklemde ψ_0 bir sabittir. Denklem (5)'teki türevin hesaplanması sonucunda tüp sınırlamasından kaynaklanan kuvvet aşağıdaki şekilde bulunur

$$F_c = \alpha k T N \left(\frac{l}{d_0} \right)^2 \quad (16)$$

Tüp kısıtlamasından kaynaklanan yarıçapsal kuvvet F_c 'nin tüp yarıçapına bağlı değişimi Şekil 10'da gösterilmiştir.



Şekil 10. Tüp kısıtlamasından kaynaklanan yarıçapsal kuvvetin tüp yarıçapına bağlı değişimi (Miehe vd., 2004).

Polimer zincirlerinin oluşturduğu ağ modeli

Makroskopik model, uzayda rastgele şekilde yönlendirilmiş ve mekanik davranışı bir önceki kısımda anlatılmış olan zincirlerin bir küre üzerinde integrasyonu sonucunda bulunur. Makroskopik ölçekte de denklem (3)'e benzer şekilde makroskopik serbest enerji $\bar{\Psi}$ zincirlerin serbest hareketinden kaynaklanan $\bar{\Psi}_f(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}})$ ve tüp kısıtlamalarından kaynaklanan $\bar{\Psi}_c(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}})$ enerjilerin toplamı şeklinde ifade edilir

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}_f(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}}) + \bar{\Psi}_c(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}}). \quad (17)$$

Yukarıdaki denklemde \mathbf{g} Euler metriğini, $\bar{\mathbf{F}}$ ise makroskopik deformasyon gradyan tensörünü betimler. Makroskopik Kirchhoff gerilimi $\bar{\boldsymbol{\tau}} = 2\partial_{\mathbf{g}} \bar{\Psi}(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}})$ ve makroskopik elastik modülü $\bar{\mathbf{C}} = 4\partial_{\mathbf{g}\mathbf{g}}^2 \bar{\Psi}(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}})$ makroskopik serbest enerjinin türevleri aracılığıyla bulunur. Denklem (17)'deki toplamsal yapıdan dolayı makroskopik gerilim $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_f + \bar{\boldsymbol{\tau}}_c$ ve makroskopik elastik modülü $\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{C}}_f + \bar{\mathbf{C}}_c$ de benzer şekilde toplam olarak ifade edilebilir.

Tek bir zincirin mekanik davranışından amorf polimer malzemeyi oluşturan rastgele şekilde yönlendirilmiş birçok zincirin davranışına geçişi sağlamak için mikro-kinematik değişken λ ile makro-kinematik değişken $\bar{\lambda}$ arasında uygun bir bağlantı kurulmalıdır. Referans konfigürasyondaki herhangi bir birim yön vektörü \mathbf{r} için makro-gerinim $\bar{\lambda}$, \mathbf{r} vektörünün makroskopik deformasyon gradyan tensörü ile eşlenmesi neticesinde elde edilen vektörün $\mathbf{t} = \bar{\mathbf{F}}\mathbf{r}$ uzunluğu (normu) olarak tanımlanır

$$\bar{\lambda} = |\mathbf{t}|. \quad (18)$$

Klasik afin modeller mikro-gerinim λ ve makro-gerinim $\bar{\lambda}$ 'ın eşit olduğunu varsayar,

$$\lambda = \bar{\lambda}. \quad (19)$$

Bu varsayımın polimerlerin büyük şekil değiştirmeler gösterdiği durumlarda yetersiz kaldığı bilinmektedir (Arruda ve Boyce 1993). Polimer ağ yapısı incelendiği zaman makroskopik uzamanın en yüksek olduğu yöndeki zincirlerin diğer zincirlere göre daha çok uzama gösterdiği gözlemlenir. Bu durum mikro ve makro-gerinimlerin eşitliği varsayımı ile uyumsuzdur. Bu nedenle mikro-gerinim λ 'nın makro-gerinim $\bar{\lambda}$ ile arasındaki ilişki aşağıdaki şekilde ifade edilmiştir

$$\lambda = \bar{\lambda}f. \quad (20)$$

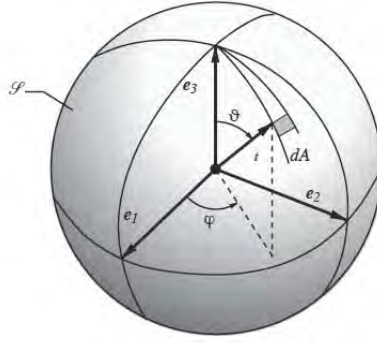
Bu ilişkide f birim-küre üzerinde tanımlanan mikro-dalgalanma alanıdır (micro-flucuation field). Mikro-küre modelindeki temel varsayım (Miehe vd., 2004) mikro ve makro gerinimler arasındaki

$$\langle \lambda \rangle_p = \langle \bar{\lambda} \rangle_p \quad (21)$$

kısıtlamasıdır. Denklem (21)'de $\langle \bullet \rangle_p$ p-kökü ortalama operatörü olarak tanımlanır ve birim küre üzerinde alınan integral ile hesaplanır

$$\langle \lambda \rangle_p = \sqrt[p]{\langle \lambda^p \rangle} = \left(\frac{1}{|\mathcal{S}|} \int_{\mathcal{S}} \lambda^p dA \right)^{1/p}. \quad (22)$$

Yukarıdaki denklemde \mathcal{S} Şekil 11'de gösterildiği gibi birim küreyi ifade eder, p ise modelin bir malzeme parametresidir.



Şekil 11. Birim küre üzerinde birim yön vektörü t 'nin açılar (ϑ, φ) 'ye bağlı olarak parametrik gösterimi (Miehe vd., 2004).

Mikro-dalgalanma alanı f minimum ortalama serbest enerji prensibi kullanılarak bulunabilir. Bu amaçla Lagrange çarpanı kullanılarak bir en küçükleme problemi aşağıdaki şekilde tanımlanabilir

$$\bar{\Psi}_f(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}}) = \sup_{\kappa} \inf_f \left\{ \left\langle n\psi_f(\bar{\lambda} f) \right\rangle - \kappa \left(\left\langle \bar{\lambda} f \right\rangle_p - \left\langle \bar{\lambda} \right\rangle_p \right) \right\}. \quad (23)$$

Yukarıdaki en küçükleme probleminde κ (21) numaralı denklemdeki kısıtlamayı zorlayan Lagrange çarpanıdır. Bu problemin biri aşikar olan iki çözümü bulunmaktadır. Aşikar çözüm mikro-dalgalanmanın olmadığı $f = 1$ çözümüdür. Aşikar olmayan çözüm ise (Miehe vd., 2004)

$$\lambda = \left\langle \bar{\lambda} \right\rangle_p \quad (24)$$

Denklem (24)'te verilen sonuç mikro-gerinim λ 'nın makro-gerinim $\bar{\lambda}$ 'nin p-kökü ortalaması olduğunu göstermektedir. Aşikar olmayan çözümün denklem (23)'te kullanılması sonucunda zincirlerin serbest hareketinden kaynaklanan makroskopik serbest enerji aşağıdaki şekilde bulunur

$$\bar{\Psi}_f(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}}) = n\psi_f \left(\left\langle \bar{\lambda} \right\rangle_p \right). \quad (25)$$

Aşağıda tüp sınırlamasının makroskopik serbest enerjiye olan katkısı tartışılacaktır. Herhangi bir alan elemanının referans konfigürasyondaki normal vektörü \mathbf{r} 'in şekil değiştirmesi sonucu oluşan vektörü $\mathbf{n} = \bar{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{r}$ ile gösterelim. Buna bağlı olarak makroskopik alan gerinimi $\bar{\mathbf{v}}$ vektör \mathbf{n} 'in uzunluğu (normu) olarak tanımlanır. Makroskopik alan gerinimi $\bar{\mathbf{v}}$ ile mikroskopik

alan gerinimi ν arasında aşağıdaki doğrusal olmayan ilişkinin geçerli olduğu önerilmiştir (Miehe vd., 2004)

$$\nu = (\bar{\nu})^q \quad (26)$$

Bu ilişkide q mikro-küre modelinin bir malzeme parametresidir. Tüp sınırlamasından kaynaklanan makroskopik serbest enerji ise aşağıdaki şekilde ifade edilir

$$\bar{\Psi}_c(\mathbf{g}, \bar{\mathbf{F}}) = \langle n\psi_c(\bar{\nu}^q) \rangle \quad (27)$$

Afin olmayan ve afin olan mikro-küre modellerinin algoritmik olarak uygulamaları Tablo 1 ve Tablo 2'de verilmiştir.

Tablo 1. Afin olmayan mikro-küre modelinin uygulaması

Afin Olmayan Uzama (Zincir) Bölümü	
[1] Deformasyon gradyan tensörünün eş hacimli kısmının hesaplanması	$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3} \mathbf{F} \quad J = \det \mathbf{F}$
[2] Deforme olmuş tanjant vektörleri \mathbf{t}^i 'nin her bir yönelim vektörü \mathbf{r}^i için hesaplanması	$\mathbf{t}^i = \bar{\mathbf{F}} \mathbf{r}^i$
[3] Afin mikro uzamaların hesaplanması	$\bar{\lambda}^i = \mathbf{t}^i $
[4] Afin olmayan mikro uzamaların ve türevlerinin hesaplanması	$\lambda = \left[\sum_{i=1}^m (\bar{\lambda}^i)^p w^i \right]^{1/p}$ $\mathbf{h} = \sum_{i=1}^m (\bar{\lambda}^i)^{p-2} \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i w^i$ $\mathbb{H} = (p-2) \sum_{i=1}^m (\bar{\lambda}^i)^{p-4} \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i w^i$
[5] Mikro gerilmelerin ve mikro modülünün hesaplanması	$\tau_f = \mu(3N - \lambda^2)/(N - \lambda^2)\lambda \quad \text{ve} \quad c_f = \mu(\lambda^4 + 3N^2)/(N - \lambda^2)^2$
[6] Makro gerilmelerin ve makro modülünün hesaplanması	$\bar{\tau}_f = \tau_f \lambda^{1-p} \mathbf{h} \quad \text{ve} \quad \bar{c}_f = (c_f \lambda^{2-2p} - (p-1)\tau_f \lambda^{1-2p}) \mathbf{h} \otimes \mathbf{h} + \tau_f \lambda^{1-p} \mathbb{H}$
Afin Olmayan Tüp Bölümü	
[7] Deforme olmuş normal vektörleri \mathbf{n}^i 'nin hesaplanması	$\mathbf{n}^i = \bar{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{r}^i$
[8] Afin alan uzamalarının ve türevlerinin hesaplanması	

$$\bar{v}^i = |\mathbf{n}^i|$$

$$\mathbf{k} = q \sum_{i=1}^m (\bar{v}^i)^{q-2} \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i w^i$$

$$\mathbb{K} = q(q-2) \sum_{i=1}^m (\bar{v}^i)^{q-4} \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i w^i$$

$$\mathbb{G} = 2q \sum_{i=1}^m (\bar{v}^i)^{q-2} \text{sym}[\mathbf{g}^{-1} \odot (\mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i) + (\mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i) \odot \mathbf{g}^{-1}] w^i$$

[9] Makro gerilimin ve modülünün hesaplanması

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_c = -\mu NU \mathbf{k} \quad \text{and} \quad \bar{\mathbb{C}}_c = \mu NU (\mathbb{K} + \mathbb{G})$$

[10] Gerilimlerin birleştirilmesi

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_f + \bar{\boldsymbol{\tau}}_c \quad \text{and} \quad \bar{\mathbb{C}} = \bar{\mathbb{C}}_f + \bar{\mathbb{C}}_c$$

[11] Gerilim ve modülünün eş hacimsel izdüşümünün alınması ve hacimsel deformasyonun hesaba katılması

$$\boldsymbol{\tau} = p \mathbf{g}^{-1} + \bar{\boldsymbol{\tau}}: \mathbb{P}$$

$$\mathbb{C} = (p + \tilde{\kappa}) \mathbf{g}^{-1} \otimes \mathbf{g}^{-1}$$

$$-2p \mathbb{I} + \mathbb{P}^T: \left[\bar{\mathbb{C}} + \frac{2}{3} (\bar{\boldsymbol{\tau}}: \mathbf{g}) \mathbb{I} \right]: \mathbb{P} - \frac{2}{3} (\mathbb{P}^T: \bar{\boldsymbol{\tau}} \otimes \mathbf{g}^{-1} + \mathbf{g}^{-1} \otimes \bar{\boldsymbol{\tau}}: \mathbb{P})$$

Açıklamalar:

1. Birim küre üzerindeki sayısal inetgrasyonda kullanılan yönelim vektörleri \mathbf{r}^i ve ağırlıkları w^i Tablo 3'te verilmiştir.
2. \mathbb{I} ve \mathbb{P} tensörlerinin bileşenleri $\mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$ ve $\mathbb{P}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl}$ formülleri yardımıyla hesaplanır. Bu denklemlerde δ_{ij} Kronecker sembolüdür.
3. Euler metriği \mathbf{g} Kartezyen koordinat sisteminde ikinci derece birim tensör $\mathbf{1}$ 'e karşılık gelir. Benzer şekilde \mathbf{g}^{-1} de birim tensör $\mathbf{1}$ olur.
4. Eğer hacimsel enerji tanımlanmışsa $p = JU'(J)$ ve $\tilde{\kappa} = J^2 U''(J)$ şeklinde hesaplanır. Eğer malzeme sıkıştırılmaz kabul edilmişse p test tipine bağlı olarak sıkıştırılmama koşulu $J := \det \mathbf{F} = 1$ kullanılarak hesaplanır. Hacimsel serbest enerji fonksiyonu $U(J) = \frac{1}{2} \kappa (J - 1)$ olarak tanımlanabilir.
5. $\text{sym}[\mathbf{g}^{-1} \odot (\mathbf{n}^i \otimes \mathbf{n}^i)]_{ijkl} = (\delta_{ik} n_j n_l + \delta_{jk} n_i n_l) / 2$

Tablo 2. Afin mikro küre modelinin uygulaması

[1] Deformasyon gradyan tensörünün eş hacimli kısmının hesaplanması

$$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3} \mathbf{F} \quad J = \det \mathbf{F}$$

[2] Deforme olmuş tanjant vektörleri \mathbf{t}^i 'nin her bir yönelim vektörü \mathbf{r}^i için hesaplanması

$$\mathbf{t}^i = \bar{\mathbf{F}} \mathbf{r}^i$$

[3] Afin mikro uzamaların hesaplanması:

$$\bar{\boldsymbol{\lambda}}^i = |\mathbf{t}^i|$$

[4] Makro gerilimlerin hesaplanması

$$\bar{\tau} = \mu \sum_{i=1}^m \frac{3N - (\bar{\lambda}^i)^2}{N - (\bar{\lambda}^i)^2} \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i w^i$$

[5] Makro modülünün hesaplanması

$$\bar{\mathbb{C}} = \mu \sum_{i=1}^m \left[\frac{(\bar{\lambda}^i)^4 + 3N^2}{(N - (\bar{\lambda}^i)^2)^2} (\bar{\lambda}^i)^{-2} - \frac{3N - (\bar{\lambda}^i)^2}{N - (\bar{\lambda}^i)^2} (\bar{\lambda}^i)^{-2} \right] \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i \otimes \mathbf{t}^i w^i$$

[6] Gerilim ve modülünün deviatorik projeksiyonu ve hacimsel deformasyonun hesaba katılması

$$\boldsymbol{\tau} = p \mathbf{g}^{-1} + \bar{\boldsymbol{\tau}} : \mathbb{P}$$

$$\mathbb{C} = (p + \tilde{\kappa}) \mathbf{g}^{-1} \otimes \mathbf{g}^{-1}$$

$$-2p\mathbb{I} + \mathbb{P}^T : \left[\bar{\mathbb{C}} + \frac{2}{3} (\bar{\boldsymbol{\tau}} : \mathbf{g}) \mathbb{I} \right] : \mathbb{P} - \frac{2}{3} (\mathbb{P}^T : \bar{\boldsymbol{\tau}} \otimes \mathbf{g}^{-1} + \mathbf{g}^{-1} \otimes \bar{\boldsymbol{\tau}} : \mathbb{P})$$

Açıklamalar:

1. Birim küre üzerindeki sayısal inetgrasyonda kullanılan yönelim vektörleri \mathbf{r}^i ve ağırlıkları w^i Tablo 3'te verilmiştir.
2. \mathbb{I} ve \mathbb{P} tensörlerinin bileşenleri $\mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ ve $\mathbb{P}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) - \frac{1}{3} \delta_{ij}\delta_{kl}$ formülleri yardımıyla hesaplanır. Bu denklemlerde δ_{ij} Kronecker sembolüdür.
3. Euler metriği \mathbf{g} Kartezyen koordinat sisteminde ikinci derece birim tensör $\mathbf{1}$ 'e karşılık gelir. Benzer şekilde \mathbf{g}^{-1} de birim tensör $\mathbf{1}$ olur.
4. Eğer hacimsel enerji tanımlanmışsa $p = JU'(J)$ ve $\tilde{\kappa} = J^2 U''(J)$ şeklinde hesaplanır. Eğer malzeme sıkıştırılmaz kabul edilmişse p test tipine bağlı olarak sıkıştırılmama koşulu $J := \det \mathbf{F} = 1$ kullanılarak hesaplanır. Hacimsel serbest enerji fonksiyonu $U(J) = \frac{1}{2} \kappa (J - 1)$ olarak tanımlanabilir.

Birim küre üzerinde integrasyon

Şekil 11'te gösterildiği gibi referans konfigürasyondaki birim yön vektörü açılar (ϑ, φ) 'ye bağlı olarak aşağıdaki şekilde ifade edilebilir

$$\mathbf{r}(\varphi, \vartheta) = \cos \varphi \sin \vartheta \mathbf{e}_1 + \sin \varphi \sin \vartheta \mathbf{e}_2 + \cos \vartheta \mathbf{e}_3 \quad (28)$$

$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ ve \mathbf{e}_3 kartezyen taban vektörleridir. Yönelimlerin uzayda eşit şekilde dağılımını sağlayacak olan olasılık yoğunlukları $p(\varphi) = 1/2\pi$ ve $p(\vartheta) = \sin \varphi/2$ olarak ifade edilir. Yön vektörünün (ϑ, φ) ile $(\vartheta + d\vartheta, \varphi + d\varphi)$ arasındaki sonsuz küçük aralığa düşme olasılığı

$$dP(\varphi, \vartheta) = p(\varphi)p(\vartheta)d\varphi d\vartheta = \frac{1}{4\pi} \sin \vartheta d\varphi d\vartheta \quad (29)$$

olarak hesaplanır. Bu denklemde $dA = \sin\theta d\varphi d\theta$ toplam yüzey alanı $|S| = 4\pi$ olan birim küre üzerindeki sonsuz küçük alan elemanını gösterir. Buna bağlı olarak birim küre üzerinde alan değişkeni

$$A = \int_0^\theta \int_0^\varphi \sin\theta d\varphi d\theta \quad (30)$$

tanımlanabilir. Alanın birim küre üzerinde eşit şekilde dağılımını sağlayacak olan olasılık yoğunluğu $p(A) = 1/|S|$ 'dir. Yön vektörünün A ile $A + dA$ arasındaki sonsuz küçük alana düşme olasılığı aşağıdaki şekilde bulunur

$$dp(A) = p(A)dA = \frac{1}{|S|}dA. \quad (31)$$

Yukarıda verilen denklemlerin yardımıyla mikro küre üzerinde tanımlanan herhangi bir değişkenin (örneğin $v(A)$) küre üzerindeki integrasyonu aşağıdaki şekilde hesaplanır

$$\langle v \rangle = \int_S v(A) dP(A) = \frac{1}{|S|} \int_S v(A) dA \quad (32)$$

Birim kürenin yüzeyinde sürekli olarak tanımlanan integraller sayısal şekilde parçalı toplam olarak hesaplanır

$$\langle v \rangle \approx \sum_{i=1}^m v^i w^i \quad (33)$$

Yukarıdaki denklemde v^i mikro küre üzerinde tanımlanan v değişkeninin ayırık yön vektörü r^i yönündeki değeri, w^i ise sayısal integrasyonun ağırlık katsayısıdır. Sayısal integrasyon için mikro-küre üzerinde 21 ayırık yön kullanılmıştır. Kullanılan yönler ve ağırlıklar Tablo 3Tablo 3'te belirtilmiştir.

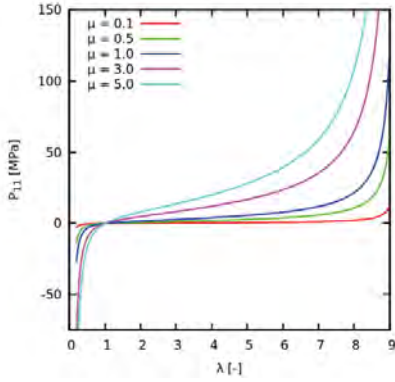
Tablo 3. Küre yüzeyinde alınan numerik integral için integrasyon noktaları ve ağırlıkları (Bazant ve Oh, 1986)

No.	r_1^i	r_2^i	r_3^i	$w^i/2$
1	0.0	0.0	1.0	0.026521424
2	0.0	1.0	0.0	0.026521424
3	1.0	0.0	0.0	0.026521424
4	0.0	0.707106781	0.707106781	0.019930148
5	0.0	-0.707106781	0.707106781	0.019930148
6	0.707106781	0.0	0.707106781	0.019930148

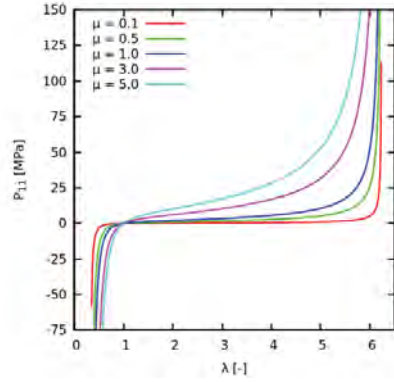
7	-0.707106781	0.0	0.707106781	0.019930148
8	0.707106781	0.707106781	0.0	0.019930148
9	-0.707106781	0.707106781	0.0	0.019930148
10	0.836095597	0.387907304	0.387907304	0.025071237
11	-0.836095597	0.387907304	0.387907304	0.025071237
12	0.836095597	-0.387907304	0.387907304	0.025071237
13	-0.836095597	-0.387907304	0.387907304	0.025071237
14	0.387907304	0.836095597	0.387907304	0.025071237
15	-0.387907304	0.836095597	0.387907304	0.025071237
16	0.387907304	-0.836095597	0.387907304	0.025071237
17	-0.387907304	-0.836095597	0.387907304	0.025071237
18	0.387907304	0.387907304	0.836095597	0.025071237
19	-0.387907304	0.387907304	0.836095597	0.025071237
20	0.387907304	-0.387907304	0.836095597	0.025071237
21	-0.387907304	-0.387907304	0.836095597	0.025071237

Mikro-küre modelinin orijinal makaledeki sonuçlarla karşılaştırılması

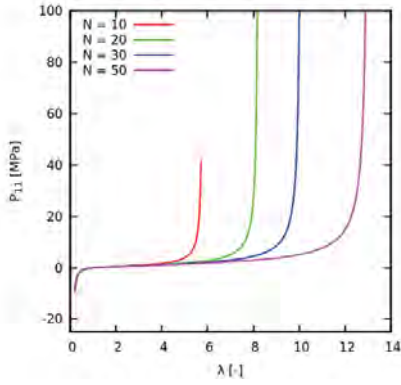
Yukarıda ana hatlarıyla özetlenmiş olan model FORTRAN programlama dilinde kodlanmıştır. Modelin doğru çalışıp çalışmadığını görmek için orijinal makalede (Miehe, vd., 2004) mevcut olan gerilim-gerinim eğrileri yeniden üretilmiştir. Mikro-küre modelinin toplam beş adet malzeme parametresi bulunmaktadır. Bu parametreler kesme modülü $\mu = nkT$, zincir segmentlerinin sayısı N , afin olmayan mikro-gerinim parametresi p , tüp geometrisi parametresi $U = \alpha(l/d_0)^2$ ve afin olmayan tüp parametresi q 'dir. Şekil 12'dan Şekil 17'e kadarki grafikler mikro-küre modelinin malzeme parametrelerinden μ , N ve p 'nin bir eksenli çekme-basma ve eş-iki eksenli çekme basma davranışına olan etkilerini göstermektedir. Bu grafiklerin elde edildiği sayısal benzetimlerde tüp sınırlamasının etkisiyle ilgili parametreler U ve q 'ya sıfır değeri verilmiştir. Başka bir deyişle tüp sınırlamasının etkisi ihmal edilmiştir. Bu grafikler orijinal makaledeki 12 numaralı grafiğe karşılık gelmektedir. Grafikler orijinal makaledeki sonuçların tıpatıp aynısıdır.



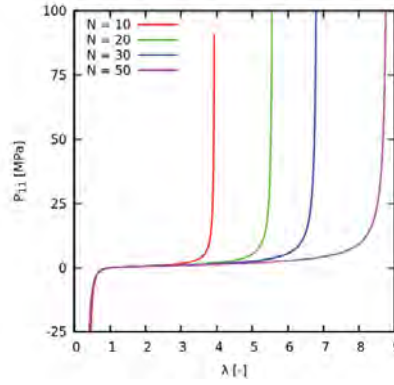
Şekil 12. Kesme katsayısının bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(a)'daki eğri.



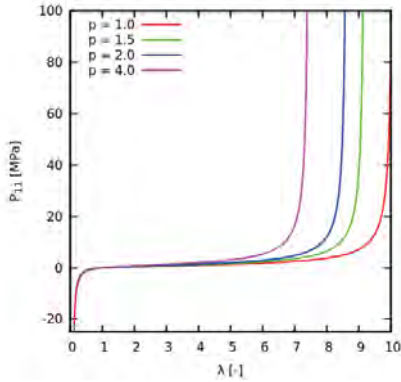
Şekil 13. Kesme katsayısının eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(b)'deki eğri.



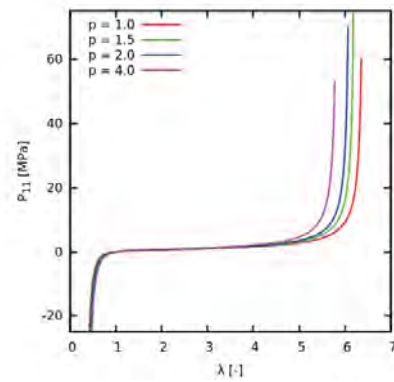
Şekil 14. Zincirdeki segment sayısının bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(c)'deki eğri.



Şekil 15. Zincirdeki segment sayısının eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(d)'deki eğri.



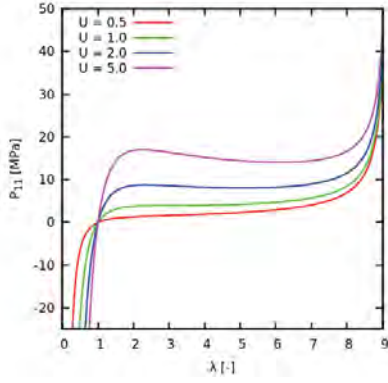
Şekil 16. p-kökü ortalama operatöründeki kuvvetin bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(e)'deki eğri.



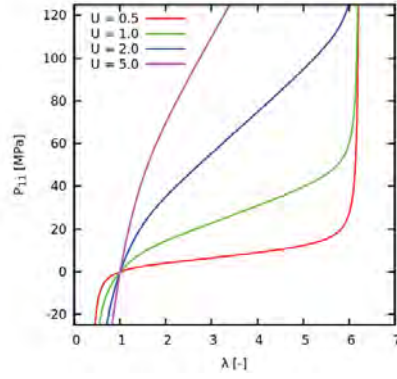
Şekil 17. p-kökü ortalama operatöründeki kuvvetin eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 12(f)'deki eğri.

Tüp sınırlamasının etkisini gözlemlemek için ayrıca sayısal benzetimler yapılmıştır. Bu çalışmanın sonuçları Şekil 18 ile Şekil 21 arasındaki grafiklerde verilmiştir. Bu grafiklerde U

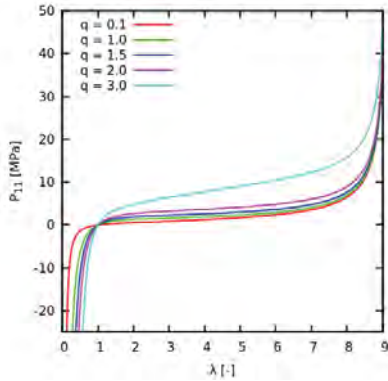
ve q parametrelerinin mikro-küre modelinin bir eksenli çekme-basma ve eş-iki eksenli çekme basma davranışına olan etkileri gösterilmiştir. Bu grafikler orijinal makaledeki 13 numaralı grafiğe karşılık gelmektedir. Grafikler orijinal makaledeki sonuçların tıpatıp aynısıdır.



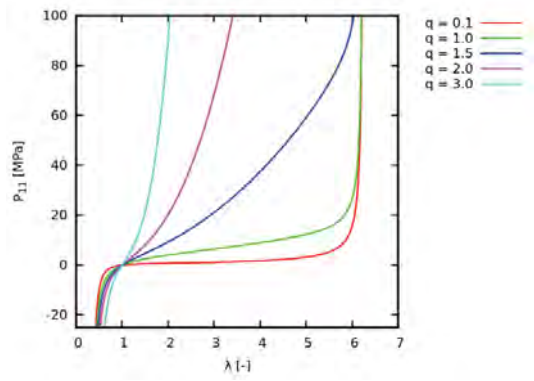
Şekil 18. Tüp geometrisi parametresi U 'nun bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(a)'daki eğri.



Şekil 19. Tüp geometrisi parametresi U 'nun eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(b)'deki eğri.

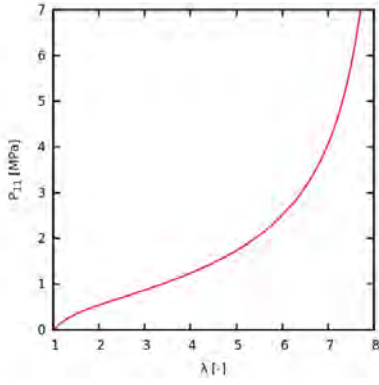


Şekil 20. q parametresinin bir eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(c)'deki eğri.

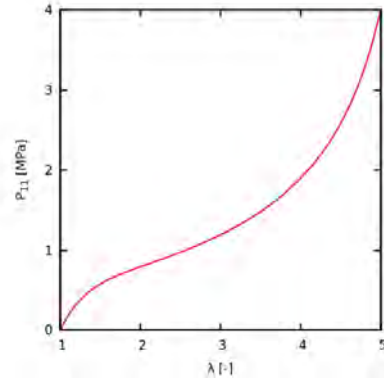


Şekil 21. q parametresinin eş-iki eksenli çekme-basma davranışına etkisi. Orijinal makaledeki şekil 13(d)'deki eğri.

Kauçuk malzemelerin bir eksenli çekme ve eş iki eksenli çekme deneylerindeki davranışını gösteren ünlü deneysel sonuçlarla (Treloar, 1944) kodlanan malzeme modelinin kıyaslaması orijinal makaledeki 14 numaralı grafikte verilmiştir. Şekil 22 ve Şekil 23'te yeniden kodlanmış olan mikro-küre modelinin malzeme parametreleri $\mu = 0.292$ MPa, $N = 22.01$, $p = 1.472$, $U = 0.744$ ve $q = 0.1086$ olduğundaki davranışları gösterilmiştir. Bu gerilim-gerinim eğrilerinin orijinal makaledeki 14 numaralı grafikteki sonuçlar ile aynı olduğu gözlemlenmiştir.



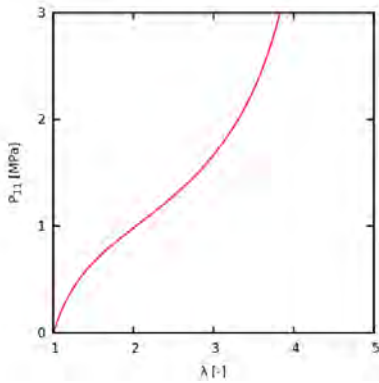
Şekil 22. Mikro-küre modelinin tek eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 14(a)'daki eğri.



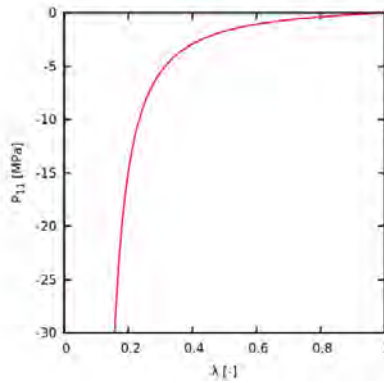
Şekil 23. Mikro-küre modelinin eş iki eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 14(b)'deki eğri.

Son olarak Şekil 24 ve Şekil 25'te orijinal makaledeki 15 numaralı grafik yeniden oluşturulmuştur. Şekil 24'te gözükten eş iki eksenli çekme testinin gerilim-gerinim grafiği malzeme parametreleri $\mu = 0.289$ MPa, $N = 14.44$, $p = 1.742$, $U = 0.176$ ve $q = 0.692$ olarak verildiğinde elde edilmiştir. Şekil 25'te gözükten tek eksenli basma testinin gerilim-gerinim grafiği ise malzeme parametreleri $\mu = 0.314$ MPa, $N = 7.214$, $p = 3.04$, $U = 9.383$ ve $q = 0.017$ olarak verildiğinde elde edilmiştir.

Miehe vd. (2004) mikro-küre modelini literatürdeki diğer deneysel sonuçlar James vd. (1975), Arruda ve Boyce (1993) ile de kıyaslamış ve modellerinin başarısını göstermişlerdir.



Şekil 24. Mikro-küre modelinin eş iki eksenli çekme deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 15(a)'daki eğri.



Şekil 25. Mikro-küre modelinin tek eksenli basma deneyindeki davranışı. Orijinal makaledeki şekil 15(b)'deki eğri.

Kodlanmış olan malzeme modelinin orijinal makaledeki Miehe vd., (2004) bir çok gerilim-gerinim eğrileri ile kıyaslaması göstermiştir ki mikro-küre modelinin teorisi iyi şekilde anlaşılabilir ve model algoritmik olarak hatasız şekilde kodlanmıştır.

3.1.2. Kristal Faz İçin Malzeme Modelinin Geliştirilmesi

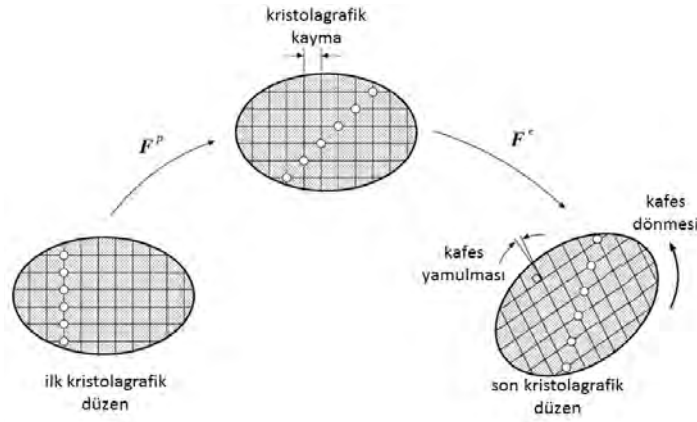
UYMAPE'in kristal fazı için geliştirilmiş malzeme modelinin ana hatları aşağıda özetlenmiştir. Bu modelin geliştirilmesinde daha önce literatürde yarı kristal polimerler için geliştirilmiş olan bir modelden faydalanılmıştır (van Dommelen vd., 2003). Model klasik kristal (visko)plastisite teorisine dayanır.

Polietilen Kristal İçin Viskoplastik Kristal Modeli

Geometrik olarak doğrusal olmayan kristal (visko)plastisitesinde kullanılan temel yaklaşım deformasyon gradyan tensörü F 'in çarpımsal ayrışımıdır (Lee, 1969)

$$F = F^e F^p. \quad (34)$$

Bu ayrışmada F^e ve F^p deformasyon gradyan tensörünün elastik ve plastik kısımlarına karşı gelmektedir. Şekil 26'da gösterildiği gibi F^p tamamen kristalografik kaymadan kaynaklanan kalıcı şekil değiştirmeye karşılık gelir. Diğer yandan F^e ise kafes yapısındaki yamulmanın ve dönmenin sebep olduğu şekil değiştirmeyi modeller. Kristal yapıları malzemelerde plastik akma yönü kayma sistemleri tarafından kontrol edilir.



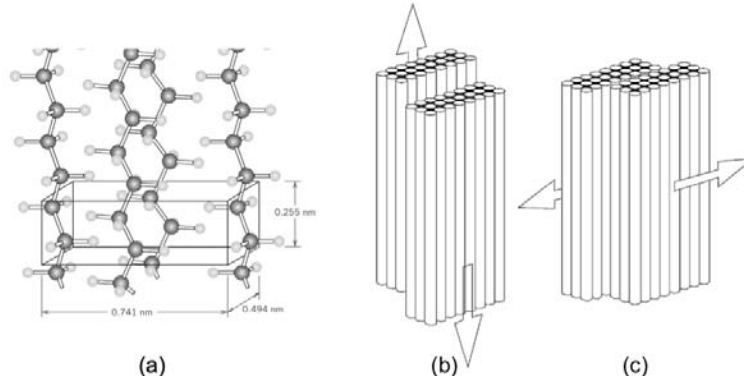
Şekil 26. Deformasyon gradyan tensörü F 'in çarpımsal ayrışımının mikromekaniksel motivasyonu (de Souza Neto vd. 2008)

Plastik hız gradyan tensörü $L^p = \dot{F}^p F^{p-1}$, farklı kayma sistemlerindeki plastik kaymaların toplamı şeklinde ifade edilebilir

$$L^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{\alpha} s^{\alpha} \otimes m^{\alpha}. \quad (35)$$

Bu denklemde $\dot{\gamma}^{\alpha}$ kayma sistemi α 'daki plastik kayma hızını, N kristal malzemedeki toplam kayma sistemi sayısını, s^{α} ve m^{α} kayma yönünü ve kayma düzlemi normalini belirtmektedir.

Kayma sistemlerini tanımlayan s^α ve m^α vektörleri ve N tamamen malzemenin kristallografik yapısına bağlıdır. UYMAPE'de mevcut olan kayma yönleri zincir boyu ve eni (zincir doğrultusuna dik) doğrultusunda olan kayma sistemleri Tablo 4'te verilmiştir. Şekil 27'de polietilen kristal kafesinin ortorombik birim hücresi ile polimer zincirine paralel yönde kayma ve polimer zincirine dik yönde kayma gösterilmiştir.



Şekil 27. (a) Polietilen kristal kafesinin ortorombik birim hücresi (Calister, 2007). Polimer kristallerde gözlemlenen (b) polimer zincirine paralel yönde kayma ve (c) polimer zincirine dik yönde kayma (Bartczak ve Galeski, 2010).

Kristal malzemenin gerilim tensörü \mathbf{S} , elastik Green-Lagrange gerinim tensörü

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}) \quad (36)$$

ile anizotropik dördüncü derece elastisite tensörü \mathbb{C}^e aracılığıyla aşağıdaki şekilde

$$\mathbf{S} = \mathbb{C}^e : \mathbf{E}^e \quad (37)$$

hesaplanır. Ortorombik kristal yapısı malzemelerin elastisite tensörü \mathbb{C}^e 'de dokuz bağımsız parametre bulunur. Bu parametrelerin sayısal değerleri literatürden (Choy ve Leung, 1985; van Dommelen vd., 2003) alınmış ve Tablo 5'te belirtilmiştir. UYMAPE'in ortorombik kristal yapısı olmasına rağmen bunlardan sadece altısı deneysel olarak Choy ve Leung (1985) tarafından ölçülmüştür. Geriye kalan üç parametre bu altı parametreden $(C_{11}, C_{22}), (C_{12}, C_{23}), (C_{44}, C_{55}, C_{66})$ modüllerinin eşit oldukları varsayımı ile (van Dommelen vd., 2003) elde edilmiştir. Polietilen kristalin birim hücresinde 3-yönü zincir doğrultusunu gösterdiği için bu yöndeki elastik katsayı C_{33} diğer değerlerden çok daha yüksektir. Denklem (36)'da \mathbf{I} ikinci derece birim tensörü göstermektedir.

Tablo 4. Polietilen kristallerindeki kayma sistemleri

	Kayma	g^α / τ_0
Zincir yönünde kayma	(100)[001]	1.0
	(010)[001]	2.5
	{110}[001]	2.5
Enine kayma	(100)[010]	1.66
	(010)[100]	2.5
	{110}\langle 1\bar{1}0 \rangle	2.2

Kirchoff gerilimi τ ile gerilim S arasında elastik deformasyon gradyan tensörü F^e aracılığıyla geçiş yapmak mümkündür

$$\tau = F^e S F^{eT} \quad (38)$$

Kayma sistemi α 'daki plastik kayma hızı $\dot{\gamma}^\alpha$ klasik viskoplastik güç kuralı (power law) kullanılarak belirtilir

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \left| \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right|^{n-1} \cdot \quad (39)$$

Burada referans kayma hızı $\dot{\gamma}_0$ ve üst n malzeme parametreleridir. Kayma sistemi α 'nın üzerine etki eden kesme gerilimi birleşeni

$$\tau^\alpha = R^{eT} \tau R^e : (s^\alpha \otimes m^\alpha) \quad (40)$$

ifadesiyle hesaplanır. Denklem (39)'da g^α kayma sistemi α 'nın kesme gerilimi dayanımı ve denklem (40)'ta R^e elastik deformasyon gradyanının dönme bileşenidir. Polietilen kristallerin kayma sistemlerinin kesme gerilimi dayanımları birbirlerinden oldukça farklıdır. Bu sebeple kayma sistemlerinin dayanımları

Tablo 4'te en temel kayma sistemi olan (100)[001] sisteminin dayanımına göreceli olarak belirtilmiştir. Tabloda τ_0 (100)[001] kayma sisteminin dayanımını gösterir.

Tablo 5. Polietilen kristalin elastik sabitleri (GPa) (Choy ve Leung, 1985)

C_{11}	C_{33}	C_{12}	C_{13}	C_{44}	C_{66}
7	81	3.8	4.7	1.5	1.6

Tablo 6. Kristal viskoplastisite modelinin uygulaması

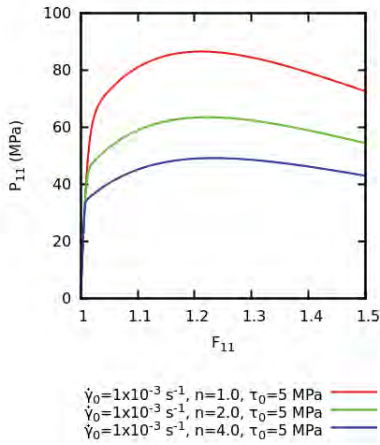
<p>[1] Deformasyon kontrollü uygulamada \mathbf{F}_{n+1} ve \mathbf{F}_n^p verilmiş olarak kabul edilir.</p>
<p>[2] Elastik deformasyon için deneme deformasyon gradyan tensörünün hesaplanması</p> $\mathbf{F}_{n+1}^{e,dene} = \mathbf{F}_{n+1} (\mathbf{F}_n^p)^{-1}$
<p>[3] Deneme elastik deformasyon gradyan tensörüne göre elastik gerilimlerin hesaplanması</p> $\mathbf{E}^{e,dene} = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}_{n+1}^{e,dene})^T \mathbf{F}_{n+1}^{e,dene} - \mathbf{I}]$ $\mathbf{S}_{n+1}^{dene} = \mathbb{C}^e : \mathbf{E}^{e,dene}$ $\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{dene} = \mathbf{F}_{n+1}^{e,dene} \mathbf{S}_{n+1}^{dene} (\mathbf{F}_{n+1}^{e,dene})^T$
<p>[4] Gerilim tensörünün kayma düzlemleri üzerindeki izdüşümünün hesaplanması</p> $\tau_{n+1}^{\alpha,dene} = (\mathbf{R}_{n+1}^{e,dene})^T \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{dene} \mathbf{R}_{n+1}^{e,dene} : (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha)$
<p>[5] Kayma dirençlerinin güncellenmesi</p> $\tau_y^{\alpha,dene} = \tau_0^\alpha + h \sum_{i=1}^N \gamma_n^\alpha$
<p>[6] Kayma miktarlarının hesaplanması</p> $\dot{\gamma}_{n+1}^{\alpha,dene} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{\alpha,dene}}{\tau_y^{\alpha,dene}} \right) \left \frac{\tau^{\alpha,dene}}{\tau_y^{\alpha,dene}} \right ^n$
<p>[7] Elastik deformasyon gradyan tensörünün hesaplanması</p> $\mathbf{F}_{n+1}^e = \mathbf{F}_{n+1}^{e,dene} \exp \left[\sum_{\alpha=1}^N -\Delta t \dot{\gamma}^{\alpha,dene} (\bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha) \right]$ $\mathbf{F}_{n+1}^p = (\mathbf{F}_{n+1}^e)^{-1} \mathbf{F}_{n+1}$
<p>[8] 1.Piola Kirchoff gerilim tensörünün hesaplanması</p> $\mathbf{P} = \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{dene} (\mathbf{F}_{n+1})^{-T}$
<p>[9] Toplam kayma miktarlarının hesaplanması</p> $\gamma_{n+1}^\alpha = \gamma_n^\alpha + \Delta t \dot{\gamma}_{n+1}^{\alpha,dene}$
<p>Açıklamalar:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $(\cdot)_{n+1}$ ve $(\cdot)_n$ parantez içerisindeki değişkenin $t = t_{n+1}$ ve $t = t_n$ anındaki değerlerine karşılık gelir. 2. $(\cdot)^{dene}$ algoritmik uygulamada <i>deneme (trial)</i> değerine karşılık gelir ve ara basamak olarak hesaplanır.

Poli-etilen polimerlerin kristal fazlarının lamel kalınlıklarının dislokasyonlar arasındaki etkileşimi önemsiz kılacak kadar ince olmasından ötürü kristal fazda deformasyona bağlı sertleşme önemli bir rol oynamaz (Lee vd., 1993). Bu sebeple Tablo 6'da kayma dayanımlarının güncellendiği adım olan 5 nolu adımda verilen h parametresi sıfır alınarak, modeldeki deformasyona bağlı sertleşme davranışı göz ardı edilmiştir.

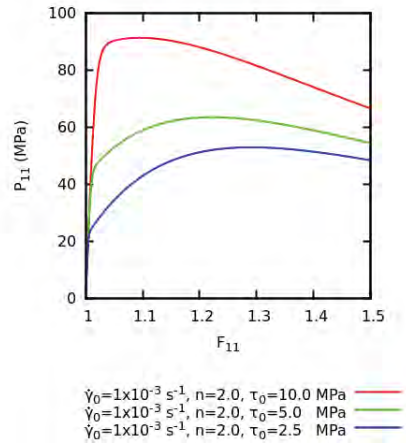
Viskoplastik Kristal Model ile Parametrik Çalışmalar

Yukarıda ana hatlarıyla özetlenmiş olan kristal viskoplastisite modeli FORTRAN programlama dilinde kodlanmıştır. Bu kısımda kodlanan modelle yapılmış olan parametrik çalışmaların sonuçları verilecektir. Modelin elastik parametreleri Tablo 5'te belirtilmiş olup bu parametreler sayısal benzetim çalışmalarında hep sabit alınmıştır.

Malzeme parametrelerinden n , τ_0 ve $\dot{\gamma}_0$ değerlerinin değiştirilmesi sonucu elde edilen bir eksenli çekme gerilim-gerinim eğrileri Şekil 28, Şekil 29 ve Şekil 30'da verilmiştir. Bu grafiklerde yatay eksen deformasyon gradyan tensörünün 11 bileşeni F_{11} dikey eksen ise birinci Piola-Kirchhoff gerilim tensörünün 11 bileşeni P_{11} 'dir. Her üç şekilde de verilen gerilim-gerinim eğrileri yükleme hızının $1 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ olduğu durumda elde edilmiştir. Beklendiği gibi n parametresi azaldıkça malzemenin yükleme hızına olan bağıllığı artış gösterdi ve malzemenin akma dayanımı arttı (Şekil 28). Şekil 29'da üç farklı τ_0 değeri için elde edilen gerilim-gerinim eğrileri verilmiştir. Doğal olarak τ_0 değeri arttıkça malzemenin ilk akma dayanımının yükseldiği gözlemlenmiştir.

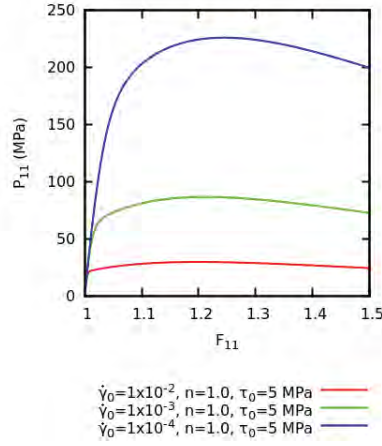


Şekil 28. Malzeme parametresi n 'in bir eksenli çekme davranışına etkisi



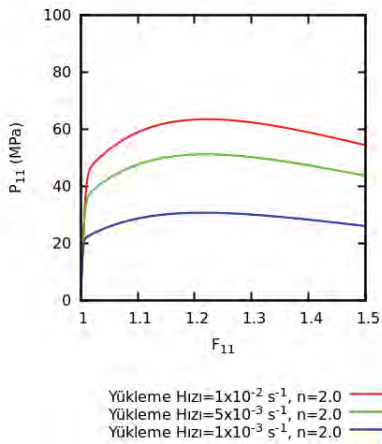
Şekil 29. Malzeme parametresi τ_0 'nun bir eksenli çekme davranışına etkisi

Şekil 30'da ise üç farklı referans kayma hız $\dot{\gamma}_0$ değeri için elde edilen gerilim-gerinim eğrileri verilmiştir. Referans kayma hızının artmasına bağlı olarak malzemenin mukavemetinin ve akma dayanımının arttığı görülmektedir.

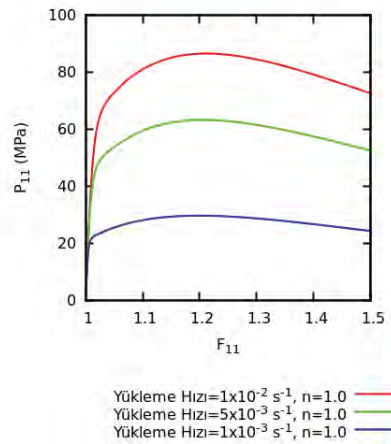


Şekil 30. Malzeme parametresi $\dot{\gamma}_0$ 'ın bir eksenli çekme davranışına etkisi

Şekil 31 ve Şekil 32'de üç farklı yükleme hızı ($\dot{\epsilon} = 1 \times 10^{-2}, 5 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) için gerilim-gerinim eğrileri n parametresinin iki farklı değeri için verilmiştir. Şekil 31'de $n = 2$ Şekil 32'de ise $n = 1$ olarak alınmıştır. Denklem (39)'da verildiği gibi klasik viskoplastik modellerde n parametresi azaldıkça malzemenin yükleme hızına bağlılığının artması gerektiği bilinmektedir. Şekil 31 ve Şekil 32'de görüldüğü gibi kodlanmış olan kristal viskoplastisite modeli de $n = 1$ için (Şekil 32) $n = 2$ olduğu duruma kıyasla daha güçlü yükleme hızı bağıllığı göstermektedir.



Şekil 31. Farklı yükleme hızlarında $n = 2$ için bir eksenli çekme davranışı

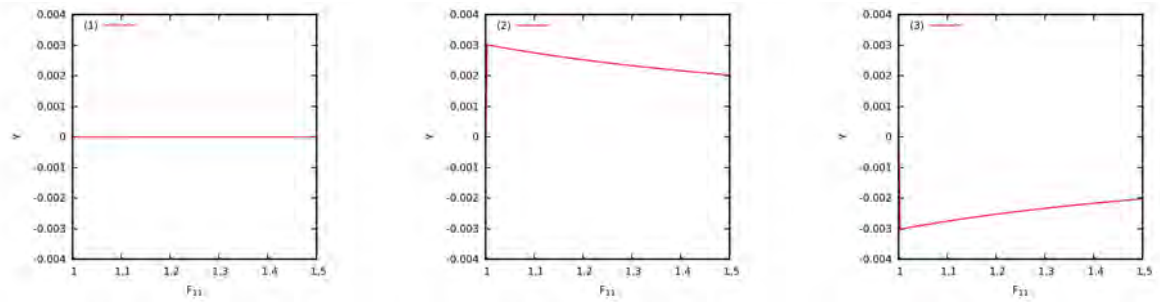


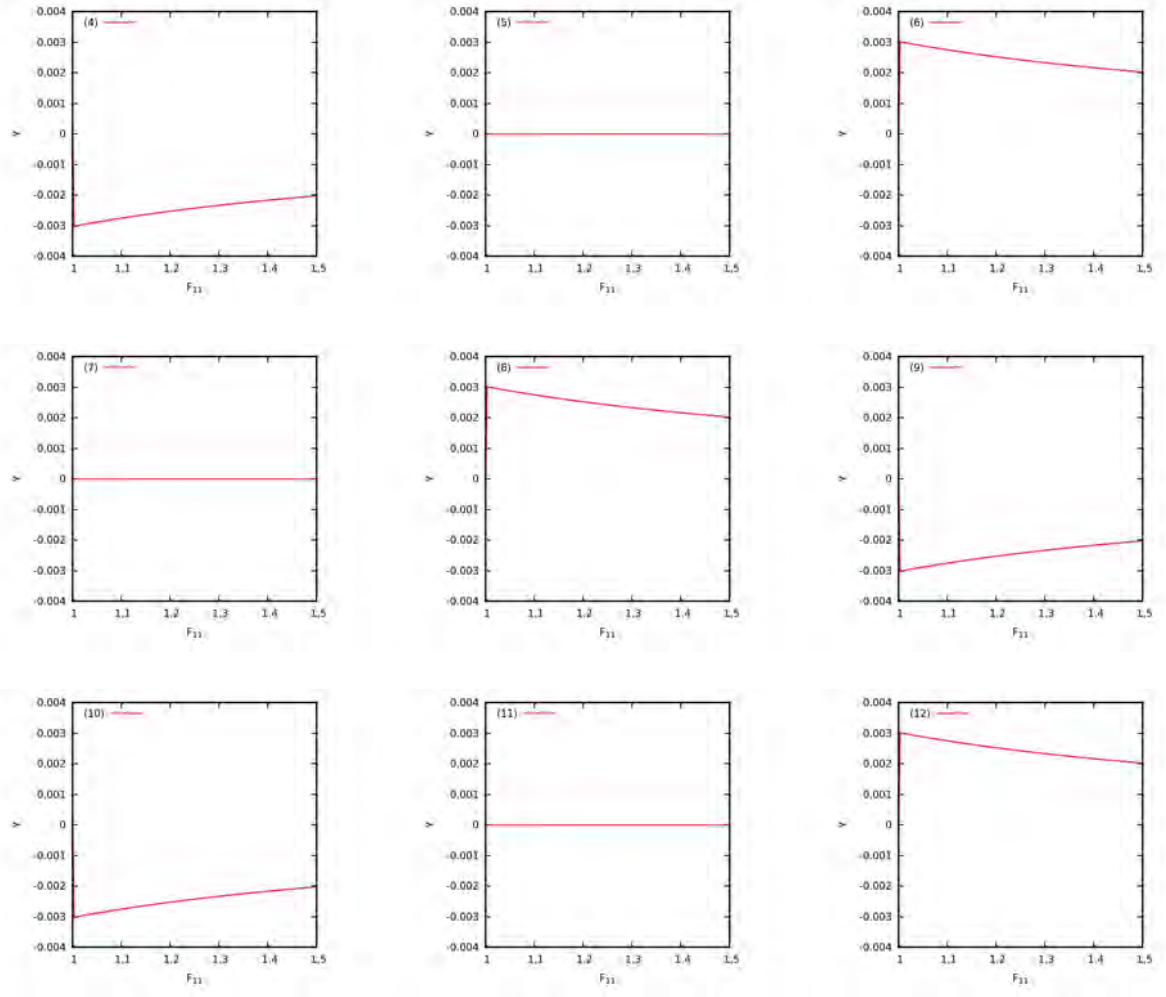
Şekil 32. Farklı yükleme hızlarında $n = 1$ için bir eksenli çekme davranışı

Son olarak viskoplastisite modelinin doğruluğunu kontrol etmek için mevcut malzeme modeli yüzey merkezli küp kafes (face centered cubic) yapısına sahip metalik malzemelere (örneğin bakır, nikel, alüminyum) yönelik olarak değiştirildi. Bu amaçla

Tablo 4'te verilen kayma sistemleri yüzey merkezli küp kafes yapıların kayma sistemleri olan $\{111\}\langle 110 \rangle$ ile değiştirildi. Yüzey merkezli küp kafeslerde $\{111\}\langle 110 \rangle$ sistemi ((s^α, m^α) ve $(-s^\alpha, m^\alpha)$ sistemlerinin iki ayrı sistem olarak düşünülmediği zaman) kristalografik olarak eşdeğer olan on iki kayma sistemine karşılık gelmektedir. (s^α, m^α) ve $(-s^\alpha, m^\alpha)$ sistemleri iki ayrı kayma sistemi olarak gözönüne alındığı zaman toplam kayma sistemi sayısı yirmi dört olmaktadır. Ayrıca on iki kayma sistemi de eşdeğer olduğu için bütün sistemler için $g^\alpha / \tau_0 = 1$ olarak kullanıldı. Buna ek olarak elastisite tensörü C^e 'de kübik simetriye sahip küp kafes yapılara uygun şekilde sadece üç bağımsız parametreye bağlı olacak şekilde değiştirildi.

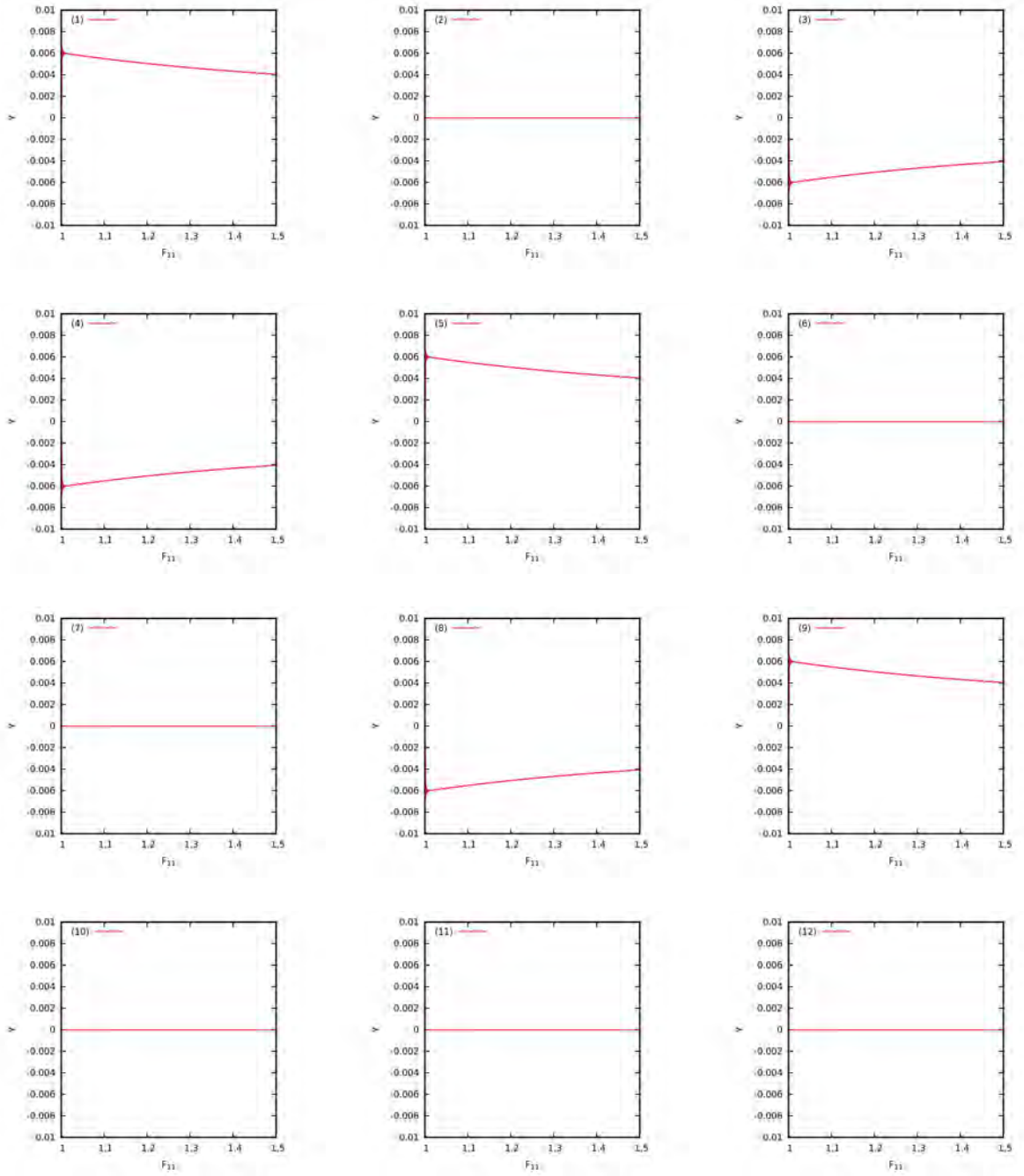
Yapılan bu değişikliklerden sonra tek eksenli çekme deneyleri iki farklı kristal oryantasyonu için yapıldı. Kristalin $[001]$ eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyinin sonucunda elde edilen sonuçlar $F_{11} - \dot{\gamma}^\alpha$ (plastik kayma hızının deformasyon gradyan tensörünün 11 bileşenine bağlı değişimi) grafikleri şeklinde Şekil 33'te verilmiştir. Bu oryantasyon yüzey merkezli küp kafeslerde en fazla sayıda (sekiz adet) kayma sistemini etkin hale getirir (Havner, 2005). Bu sekiz sisteme etki eden kesme gerilimi birleşenlerinin mutlak değerleri aynıdır. Ayrıca yukarıda belirtildiği gibi g^α değeri yüzey merkezli küp kafeslerde bütün kayma sistemleri için eşittir. Bu sebeplerden dolayı Şekil 33'te görüldüğü gibi denklem (39)'da verilen plastik kayma hızı $\dot{\gamma}^\alpha$ 'nın mutlak değeri bu sistemler için aynıdır. Diğer dört sistemin üzerine etki eden kesme gerilimi birleşeni sıfır olduğu için bu dört sistem etkin hale geçmez ve $\dot{\gamma}^\alpha = 0$ olarak kalır.





Şekil 33. Yüzey merkezli küp kafes kristalin [001] eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyi sonucunda oluşan on iki farklı kayma sistemindeki $\dot{\gamma}^\alpha$ değerleri. Dört sistem etkin hale geçmezken sekiz sistem aynı miktarda etkinleşmekte.

Kristalin [111] eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyinin sonuçları Şekil 34'te verilmiştir. Bu yön yüzey merkezli küp kafeslerde [001]'den sonra en fazla sayıda (altı adet) kayma sistemini etkin hale getiren yöndür (Havner, 2005). Aktif olan altı sisteme etki eden kesme gerilimi birleşenlerinin mutlak değerleri aynıdır. Buna bağlı olarak Şekil 34'te görüldüğü gibi plastik kayma hızı $\dot{\gamma}^\alpha$ 'nın mutlak değeri bu altı sistem için aynıdır. Diğer altı sistemin üzerine etki eden kesme gerilimi birleşeni sıfır olduğu için bu sistemler etkin hale geçmez ve $\dot{\gamma}^\alpha = 0$ olarak kalır.



Şekil 34. Yüzey merkezli küp kafes kristalin [111] eksenine paralel yönde yapılan çekme deneyi sonucunda oluşan 12 farklı kayma sistemindeki γ^{α} değerleri. Altı sistem etkin hale geçmezken altı sistem aynı miktarda etkinleşmektedir.

Kodlanmış olan kristal viskoplastisite modeli ile yapılan parametrik çalışmaların sonucunda modelin beklendiği şekilde davrandığı gözlemlenmiş ve bunun neticesinde kristal viskoplastisitesinin algoritmik olarak hatasız şekilde kodlanmış olduğu sonucuna varılmıştır.

3.2. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirecek Bir Yöntemin Geliştirilmesi

Amorf ve kristal fazlardan oluşan yapıyı homojenleştirmek için burada iki adet yöntem kullanılmıştır. İlk yöntem Taylor tipi homojenleştirme tekniğini kullanmaktadır. Bölüm 3.2.1'de Taylor tipi afin homojenleştirme yöntemi tanıtılmış, amorf ve kristal fazların bu yöntem ile homojenizasyonundan elde edilen basit çekme analiz sonuçları verilmiştir. Taylor tipi homojenleştirme basit olması ve metaller için başarılı performans göstermesi avantajlarına karşın UYMAPE için mikromekaniksel dayanağı olmayan bir yaklaşımdır. Bölüm 3.2.2'de UYMAPE için bu proje kapsamında önerilen mikromekaniksel motivasyonlu afin olmayan model tanıtılmış, modelin implementasyon detayları verilmiş ve başarımı tartışılmıştır.

3.2.1. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirme Yöntemi (Afin Model)

Bu bölümde Taylor tipi homojenleştirmenin ilkeleri, önce kristal fazdan ibaret olan yapıların homojenleştirilmesinde kullanılmış ve basit çekme analiz sonuçlarında homojenleştirilen yapı sayısı arttıkça bu yöntemin kabullerine bağlı görülen etkilerden bahsedilmiştir. Son olarak amorf ve kristal fazların Taylor yöntemi ile homojenize edilmesi (afin model) tartışılmış ve bu yöntem ile elde edilen analiz sonuçları verilmiştir.

Taylor Tipi Tekil-Kristalden Çoklu Kristale Geçiş (Homojenleştirme) Yöntemi

Kristal yapı malzemelerin homojenleştirmesinde Taylor (Taylor, 1938) tipi homojenleştirme basit olmasından dolayı sıklıkla kullanılmış ve hala kullanılmaktadır. Bu yöntemdeki temel varsayım malzemeyi oluşturan her bir bileşenin (fazın) aynı makroskopik deformasyona tabi olduğudur. Tekil-kristalden çoklu-kristale geçiş problemi için bu varsayım her bir tekil-kristalin aynı şekilde şekil değiştirmesine karşılık gelir. Her bir kristal farklı bir yönelime (orientation) sahip olduğundan deformasyon aynı olsa bile bu deformasyona karşılık gelen gerilimler farklı kristaller için farklı olacaktır.

Klasik homojenleştirme teorisi heterojen malzemelerin etkin (efektif/ortalama) mekanik özelliklerini (örneğin Young katsayısı, Poisson oranı) hesaplamaya yarar. Taylor tipi homojenleştirme bu bağlamda Voigt sınırına (Voigt bounds) karşılık gelir ve malzemenin etkin özelliği için bir üst sınır oluşturur. Heterojen malzemede gerilimin her yerde aynı olduğu varsayımı sonucunda ise Reuss sınırı (Reuss bound) alt sınır olarak elde edilir. Homojenleştirmede kabul edilen diğer varsayımların sonuçları bu iki sınır arasında kalır (Mura, 1987; Zohdi ve Wriggers, 2005; Nemat-Nasser ve Hori, 1999).

Çoklu-kristal yapının N adet tekil-kristalden oluştuğunu ve makroskopik şekil değiştirmenin makroskopik deformasyon gradyan tensörü \bar{F} tarafından tanımlandığını varsayalım. (Bu kısımda önceki kısımdan farklı olarak \bar{F} izokorik deformasyon gradyan tensörünü göstermek

için kullanılmamıştır.) Her bir kristalin maruz kaldığı deformasyon gradyan tensörlerini de $F_i, i = 1 \dots N$ ile ifade edelim. Taylor tipi homojenleştirmenin temel varsayımından dolayı (Taylor, 1938) aşağıdaki ilişki geçerli olur.

$$\bar{F} = F_1 = F_2 = \dots = F_N \quad (41)$$

Her bir tekil kristal için deformasyon gradyan tensörü F_i viskoplastik kristal modeline girdi olarak girer. Viskoplastik kristal modelinin bünye denklemleri kullanılarak her bir kristaldeki 1.Piola-Kirchhoff gerilim tensörü P_i hesaplanır. Kristallerin anizotropik yapısından ve her birinin farklı yönelimlere sahip olmasından ötürü her bir kristaldeki gerilim birbirinden farklıdır

$$P_1 \neq P_2 \neq \dots \neq P_N \quad (42)$$

Benzer şekilde algoritmik viskoplastik malzeme tanjantı da (consistent tangent modulus) her bir kristal için farklılık gösterir

$$C_1 \neq C_2 \neq \dots \neq C_N \quad (43)$$

Çoklu-kristalin homojenleştirme sonucunda elde edilen makroskopik gerilim tensörü ve makroskopik algoritmik viskoplastik malzeme tanjantı ortalama değer olarak aşağıdaki şekilde hesaplanır

$$\bar{P} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_i \quad \bar{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i \quad (44)$$

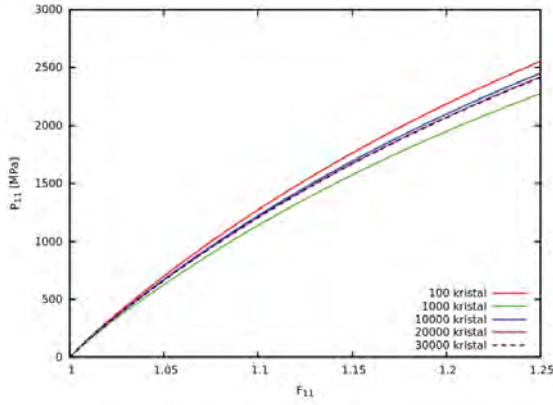
Taylor tipi homojenleştirme yönteminde her bir kristal aynı şekilde şekil değiştirmeye uğradığı için kristaller arasında uyum (compatibility) sağlanır. Fakat kristallerin uzaysal (spatial) dağılımı dikkate alınmadığı için kristaller arasındaki fiziksel etkileşimden ve kristaller arası gerilim dengesinden bahsedilemez.

Ortorombik çoklu-kristalin çekme testi sonuçları

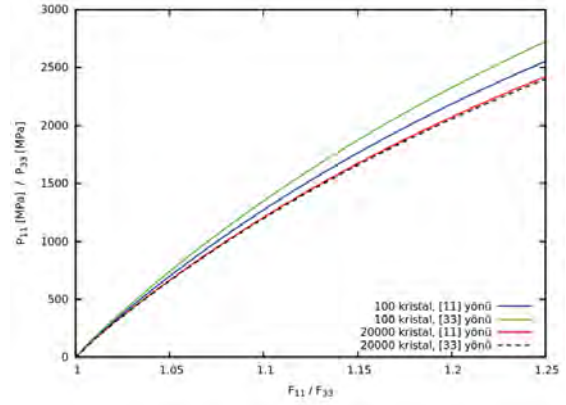
Taylor tipi homojenleştirme yöntemini kullanan gelişigüzel yönelimlere sahip tekil kristallerden oluşan çoklu-kristal ile ilgili gerilim-gerinim davranışı üzerine çalışmalar yapılmıştır. Şekil 35'te tek eksenli çekme testi için gerilim-gerinim eğrilerinin kristal sayısına bağlı değişimi ortorombik kristaller için gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi kristal sayısı yeteri kadar yüksek seçildiği zaman (>10000) gerilim-gerinim eğrileri aynı olmaktadır. Ayrıca ortorombik çoklu-kristal malzemenin viskoplastik davranışının eş yönlü olduğunu göstermek için 1 ve 3 yönlerinde ayrı ayrı tek eksenli çekme testleri yapılmıştır. Şekil 36'da iki farklı kristal sayısı için 1 ve 3 yönlerindeki çekme testi sonuçları verilmiştir. 100 kristal için gerilim-

gerinim eğrileri farklılık gösterirken 20000 kristal için her iki yöndeki çekme testlerinin sonuçları örtüşmektedir.

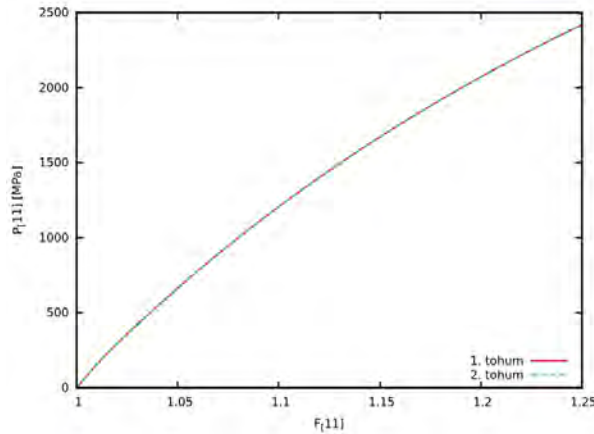
Son olarak farklı tohum değerleri kullanılarak çekme testleri ortorombik 20000 kristal için tekrarlanmıştır. Kullanılan iki farklı tohum değeri için elde edilen gerilim-gerinim eğrileri Şekil 37'de verilmiştir. İki farklı tohum vererek yaratılan gelişigüzel yönelimlere sahip iki farklı çoklu-kristalin davranışları beklendiği gibi aynıdır.



Şekil 35. Tek eksenli çekme testi. 1-yönünde çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin kullanılan kristal sayısı ile değişimi. Analizler ortorombik kristaller için yapılmıştır.



Şekil 36. Tek eksenli çekme testi. 1 ve 3-yönlerinde yapılan çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin uyumunun kullanılan kristal sayısı ile değişimi. Analizler ortorombik kristaller için yapılmıştır.



Şekil 37. Tek eksenli çekme testi. Farklı tohum değerlerinin 1-yönündeki tek eksenli çekme gerilim-gerinim eğrilerine etkisi. Analizler 20000 kristal ile yapılmıştır.

İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirme Yöntemi (Afin Model)

İki fazlı yapıyı homojenleştirecek yöntemde, kristal fazın davranışı Taylor homojenleştirme yöntemi kullanılarak tekil kristalden çoklu kristale geçiş sağlanarak elde edilmiştir. Amorf fazın davranışı için Bölüm 3.1.1'de özetlenmiş olan mikro-küre modeli kullanılmıştır. Homojenleştirme yönteminde amorf ve kristal fazlardaki şekil değiştirmenin aynı olduğu kabul edilmiştir. Diğer bir deyişle makroskopik deformasyon gradyan tensörünü \bar{F} , amorf ve kristal fazlardaki deformasyon gradyan tensörlerini de F_A ve F_K ile gösterirsek, aşağıdaki ilişki geçerlidir

$$\bar{F} = F_K = F_A \quad (45)$$

Kristal fazdaki gerilimi P_K ile, amorf fazdaki gerilimi de P_A ile gösterdiğimizizi düşünürsek iki fazlı yarı-kristal polimerdeki makroskopik gerilim (1. Piola-Kirchhoff gerilimi)

$$P = \xi P_K + (1 - \xi) P_A \quad (46)$$

olarak ifade edilir. Denklem (46)'da ξ kristal fazın hacimsel oranını göstermektedir. Dolayısıyla $(1 - \xi)$ amorf fazın hacimsel oranına karşılık gelmektedir. Benzer şekilde algortimik malzeme tanjantı da

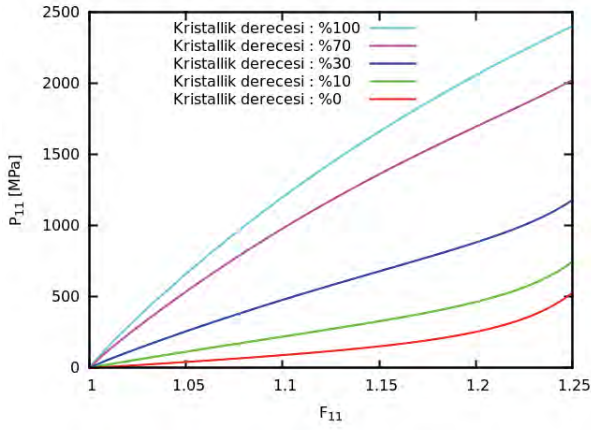
$$C = \xi C_K + (1 - \xi) C_A \quad (47)$$

şeklinde hesaplanır. Denklem (47)'de C_K kristal fazın algortimik malzeme tanjantını, C_A ise amorf fazın algortimik malzeme tanjantını ifade eder.

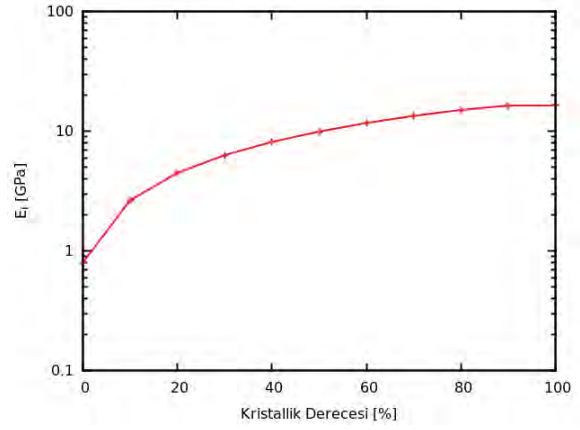
Şekil 38'de kristal fazın hacimsel oranının değişimine bağlı olarak elde edilen tek eksenli çekme testi sonuçları verilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi amorf fazın hacimsel oranı arttıkça malzemenin davranışı amorf malzemenin davranışına yakınsar. $\xi = 1$ olduğu durumda gerilim-gerinim eğrisi çoklu-kristalin gerilim gerinim eğrisi ile, $\xi = 0$ olduğu durumda ise gerilim-gerinim eğrisi amorf mikro-küre modelinin gerilim-gerinim eğrisi ile örtüşür. Amorf fazın davranışı kristal faza göre daha yumuşak olduğu için beklenildiği gibi ξ değeri arttıkça malzemenin dayanımı da artış gösterir.

Şekil 39'da ilk elastik modülün (initial elastic modulus) kristal fazın hacimsel oranını ile değişimi çizilmiştir. İlk elastik modül

Şekil 38'deki eğrilerin $F_{11} = 1$ noktasındaki tanjantı hesaplanarak elde edilmiştir. İlk elastik modül kristal fazın hacim oranı arttıkça artış gösterir.



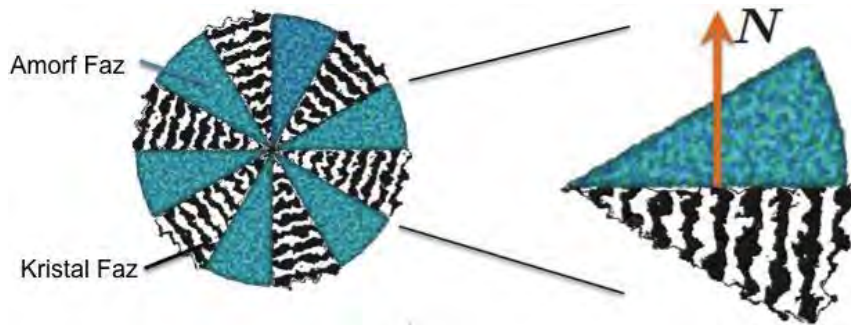
Şekil 38. Tek eksenli çekme testi.1-yönünde çekme analizlerinin gerilim-gerinim eğrilerinin kristal fazın hacimsel oranına bağlı değişimi



Şekil 39. İlk elastik modülün (initial elastic modulus) kristal fazın hacimsel oranını ile değişimi

3.2.2. İki Fazlı Yapıyı Homojenleştirme Yöntemi (Afin Olmayan Model)

UYMAPE'in iki fazlı makroskopik davranışını çok ölçekli modellerle tanımlamak için malzemenin mikro-yapısında bulunan kristal ve amorf fazların davranışlarının homojenleştirilmesine ihtiyaç vardır. Bu sebeple UYMAPE'in makroskopik davranışını elde etmek için kristal ve amorf fazlar için geliştirilmiş olan alt modellerin homojenleştirilecek bir yöntem geliştirilmiştir. UYMAPE'de bulunan tipik morfolojik yapılardan biri küresel mikro-yapıdır. Şekil 40'ta gösterilen idealize mikro-yapı aynı merkezli kristal ve amorf dilimlerden oluşmaktadır. Kristal ve amorf dilimlerin büyüklükleri mevcut UYMAPE'in kristallik derecesine bağlıdır.



Şekil 40. Küresel kristal mikro-yapının ve kristal ve amorf fazlardan oluşan iki dilimin arasındaki arayüzün ve normal vektörünün şematik olarak gösterimi.

Küresel Mikro-Yapıdaki Deformasyon Gradyan Tensörlerinin Hesabı

Homojenleştirme metodunda Şekil 40'ta gösterilen şematik yapı baz alınmış ve gerilim vektörünün iki faz arasındaki arayüz boyunca sürekli olduğu kabul edilmiştir. Bu koşul matematiksel olarak aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$(\mathbf{P}^c - \mathbf{P}^a) \cdot \mathbf{N} = \mathbf{0} \quad (48)$$

Bu denklemde Şekil 40'ta gösterildiği gibi, \mathbf{P}^c ve \mathbf{P}^a birbirine komşu kristal ve amorf dilimlerdeki birinci Piola-Kirchhoff gerilim tensörüne, \mathbf{N} iki komşu dilimi ayıran arayüze dik birim vektöre karşılık gelir. Ayrıca iki fazdaki şekil değiştirmelerin arayüzde kinematik olarak uyumlu oldukları geliştirilen modelin diğer bir kabulüdür. Kinematik uyumluluk küresel mikroyapıdaki şekil değiştirmelere aşağıdaki sınırlamaları getirir:

$$(\mathbf{F}^c - \mathbf{F}^a) \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0} \quad (49)$$

$$(\mathbf{F}^c - \mathbf{F}^a) \cdot \mathbf{S} = \mathbf{0} \quad (50)$$

Bu denklemde \mathbf{M} ve \mathbf{T} arayüz düzleminde birbirine paralel olmayan iki birim vektörü, \mathbf{F}^c ve \mathbf{F}^a birbirine komşu kristal ve amorf dilimlerdeki deformasyon gradyan tensörüdür.

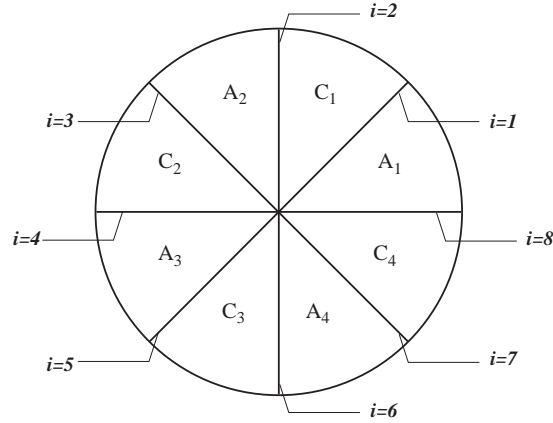
Makroskopik deformasyon gradyan tensörü $\bar{\mathbf{F}}$ her bir fazdaki deformasyon gradyan tensörlerinin hacimleri oranında ağırlıklı ortalaması olacak ve dilimler üzerinde bir toplam şeklinde ifade edilecektir:

$$\bar{\mathbf{F}} = \sum_i [v^c \mathbf{F}_i^c + v^a \mathbf{F}_i^a] \quad (51)$$

v^c ve v^a kristal ve amorf fazların hacim oranlarını gösterir ve doğal olarak iki fazlı yapıda aşağıdaki koşulu sağlarlar

$$v^c + v^a = 1. \quad (52)$$

Bu homojenleştirme metodu Taylor ve Sachs homojenleştirme yöntemlerinin aksine mikroyapıdaki şekil değiştirmelerin ya da gerilimlerin afin olduğu varsayımını kullanmamıştır. Diğer bir deyişle mikroyapının her bir dilimindeki deformasyon gradyan tensörleri homojenleştirme metodunun bilinmeyenleridir. Bu bilinmeyenler her bir arayüz için yukarıda belirtilen gerilim vektörünün sürekliliği ve kinematik uyumluluk koşulları kullanılarak bulunacaktır. Bunun sonucunda doğrusal olmayan bir denklem sistemi elde edilecek ve bu sistem doğrusallaştırılarak Newton-Raphson yöntemi ile tekrarlı bir şekilde çözülecektir.



Şekil 41. Dört amorf ve dört kristal fazdan oluşan ve amorf ve kristal fazların hacim oranları $v^c = v^a = 0.5$ olan mikro-yapı.

Mikro-yapının dört kristal dilim C_1, C_2, C_3, C_4 , ve dört amorf dilimden A_1, A_2, A_3, A_4 oluştuğu ve amorf ve kristal fazların hacim oranlarının $v^c = v^a = 0.5$ olduğu durum Şekil 41'de gösterilmiştir. Bu bölümde homojenleştirme yöntemi sekiz dilimli mikro-yapı temel alınarak tartışılacaktır. Fakat anlatılacak yöntem daha az ya da daha fazla sayıda dilimden oluşan mikro-yapılar için de uygulanabilir. Her bir dilimdeki deformasyon gradyan tensörlerinin değerleri bilinmediği için sekiz dilimli mikro-yapıda $8 \times 9 = 72$ adet bilinmeyen bulunmaktadır. (Deformasyon gradyan tensörü simetrik olmadığı için dokuz tane bilinmeyenden oluşmaktadır.) Bu mikro-yapı için kristal ve amorf dilimlerin komşuluk durumları aşağıda verilmiş olan 8×2 boyutlu matris ile tanımlanabilir

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 3 \\ 3 & 4 \\ 4 & 4 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} \quad (53)$$

Yukarıda verilen Γ matrisinde ilk kolon kristal fazın dilim numarasını, ikinci kolon amorf fazın dilim numarasını göstermektedir. Matrisin her bir satırı ise Şekil 41'de 'i' ile gösterilen arayüz numarasına karşı gelmektedir. Arayüz i için (48), (49) ve (50) numaralı denklemleri alt alta yazarak 9×1 boyutunda bir artık vektörü R_i elde edilebilir

$$\mathbf{R}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_i^I \\ \mathbf{r}_i^{II} \\ \mathbf{r}_i^{III} \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (54)$$

Denklem (54)'ü oluşturan \mathbf{r}_i^I , \mathbf{r}_i^{II} ve \mathbf{r}_i^{III} 3x1'lik vektörler olup aşağıdaki şekilde tanımlanır

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^I &= (\mathbf{F}_{\Gamma_{i1}}^c - \mathbf{F}_{\Gamma_{i2}}^a) \cdot \mathbf{T}_i = \mathbf{0} \\ \mathbf{r}_i^{II} &= (\mathbf{F}_{\Gamma_{i1}}^c - \mathbf{F}_{\Gamma_{i2}}^a) \cdot \mathbf{S}_i = \mathbf{0} \\ \mathbf{r}_i^{III} &= (\mathbf{P}_{\Gamma_{i1}}^c - \mathbf{P}_{\Gamma_{i2}}^a) \cdot \mathbf{N}_i = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (55)$$

Bu şekilde her bir arayüz için dokuz adet denklem yazılabilir. Mikro-yapıda toplam sekiz adet arayüz bulunduğundan toplam denklem sayısı da $8 \times 9 = 72$ olur. Bu şekilde 72 bilinmeyen ve 72 denklemden oluşan bir sistem elde edilmiş olur. Her ne kadar bu sistem, denklem ve bilinmeyen sayıları eşit olduğu için çözülebilecek makul bir sistem olarak gözükse de, artık vektörlerinin tamamen arayüzlere bağlı olarak denklem (55)'teki şekilde tanımlanması ile geliştirilen homojenleştirme yönteminde temel bir problem bulunmaktadır. Denklem (55)'i temel alarak bulunan farklı dilimlerdeki \mathbf{F}^c ve \mathbf{F}^a değerleri homojenleştirmenin temel prensiplerinden olan tipik hacim elemanındaki (RVE-Representative Volume Element) ortalama deformasyon gradyan tensörünün makroskopik deformasyon gradyan tensörüne eşit olma koşulunu sağlamazlar.

Bu sebepten dolayı yukarıda bahsedilen homojenleştirme yönteminde anlatıldığı şekilde küçük bir değişiklik yapılabilir. Sekiz arayüzden bir tanesi (sekizincisi) denklem sisteminde dikkate alınmaz ve amorf ve kristal dilimlerin komşuluklarını tanımlayan Γ matrisi aşağıda verildiği gibi 7×2 boyutunda bir matris olur

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 3 \\ 3 & 4 \\ 4 & 4 \end{bmatrix}. \quad (56)$$

İlk yedi arayüz için denklem (54)'te verilen artık vektörü $\mathbf{R}_i, i = 1 \dots 7$, aynı şekilde kullanılır. Sekizinci arayüz için yazılan artık vektörün yerine aşağıdaki denklem kullanılır

$$\mathbf{R}_8 = \bar{\mathbf{F}} - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 [v^c \mathbf{F}_i^c + v^a \mathbf{F}_i^a] = \mathbf{0} \quad (57)$$

Her ne kadar bu denklem ikinci dereceden bir tensör denklemi olsa da bu denklem (denklemin içindeki tensörlerin asimetrik olmasından dolayı) 9×1 boyutunda bir vektör denklemi şeklinde yazılabilir. Herhangi bir asimetrik ikinci dereceden tensör, örneğin F , vektör olarak aşağıdaki şekilde ifade edilebilir

$$F = [F_{11} \quad F_{22} \quad F_{33} \quad F_{12} \quad F_{23} \quad F_{13} \quad F_{21} \quad F_{32} \quad F_{31}]^T \quad (58)$$

Denklem (57)'de \bar{F} makroskopik deformasyon gradyan tensörüne karşılık gelmektedir. Denklem (57) makroskopik deformasyon tensörünün amorf ve kristal dilimlerdeki deformasyon gradyan tensörlerinin ortalamasına eşit olmasını ifade eder. Bu denklem simetrik olamayan ikinci dereceden bir tensör eşitliği olduğu için dokuz adet skalar denkleme karşılık gelir. Sekizinci arayüz için yazılan üç adet vektörel denklem yerine kullanıldığı zaman yine 72 bilinmeyen (sekiz dilime ait deformasyon gradyan tensörleri, $8 \times 9 = 72$) ve 72 denklemden (yedi arayüz üzerinde üçer adet vektörel denklem ve bir adet tensör denklemi, $7 \times 3 \times 3 + 9 = 72$) oluşan bir sistem elde edilir. Mikro-yapının çözümünde kullanılacak artık vektör aşağıdaki şekilde olur

$$R = [R_1 \quad R_2 \quad R_3 \quad R_4 \quad R_5 \quad R_6 \quad R_7 \quad R_8]^T = \mathbf{0}. \quad (59)$$

Denklem (59)'da R_1, \dots, R_7 (54) ve (55) numaralı denklemler kullanılarak, R_8 ise (57) numaralı denklem kullanılarak oluşturulur. Denklem (59)'un çözülebilmesi için doğrusallaştırılması gerekmektedir. Artık vektörü oluşturan herhangi bir alt vektör R_i , $i = 1 \dots 7$ koşulu için aşağıdaki şekilde doğrusallaştırılabilir

$$\text{Lin}R_i = \bar{R}_i + a_i: \Delta F_{\Gamma_{i2}}^a + c_i: \Delta F_{\Gamma_{i1}}^c \quad (60)$$

Denklem (60)'ta \bar{R}_i , artık vektör R_i 'nin doğrusallaştırma yapıldığı noktadaki değeri, a_i ve c_i tensörleri R_i vektörünün $F_{\Gamma_{i2}}^a$ ve $F_{\Gamma_{i1}}^c$ 'e göre türevleridir

$$a_i = \frac{\partial R_i}{\partial F_{\Gamma_{i2}}^a} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_i^I}{\partial F_{\Gamma_{i2}}^a} \\ \frac{\partial r_i^{II}}{\partial F_{\Gamma_{i2}}^a} \\ \frac{\partial r_i^{III}}{\partial F_{\Gamma_{i2}}^a} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_i^I \\ a_i^{II} \\ a_i^{III} \end{bmatrix} \quad (61)$$

$$\mathbb{C}_i = \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}_i^I}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} \\ \frac{\partial \mathbf{r}_i^{II}}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} \\ \frac{\partial \mathbf{r}_i^{III}}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{C}_i^I \\ \mathbb{C}_i^{II} \\ \mathbb{C}_i^{III} \end{bmatrix} \quad (62)$$

\mathbb{a}_i ve \mathbb{C}_i tensörleri bir vektörün ikinci dereceden bir tensöre göre türevleri oldukları için aslında üçüncü dereceden tensörlerdir. Bu tensörlerin bileşenleri 9×9 boyutunda matrisin elemanları olarak saklanabilir. \mathbb{C}_i ve \mathbb{a}_i tensörlerinin matris şeklinde ifadesi sırasıyla Denklem (63) ve (64)'te verilmiştir.

$$\mathbb{C}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \\ \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{11}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{22}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{33}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{12}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{23}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{13}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{21}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{32}} & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i1}^c)_{31}} \end{bmatrix} \quad (63)$$

$$\mathbb{a}_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i2}^a)_{11}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial(r_i^I)_1}{\partial(F_{i2}^a)_{31}} \\ \vdots & \frac{\partial(r_i^I)_2}{\partial(F_{i2}^a)_{22}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^I)_3}{\partial(F_{i2}^a)_{33}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^{II})_1}{\partial(F_{i2}^a)_{12}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^{II})_2}{\partial(F_{i2}^a)_{23}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^{II})_3}{\partial(F_{i2}^a)_{13}} & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^{III})_1}{\partial(F_{i2}^a)_{21}} & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\partial(r_i^{III})_2}{\partial(F_{i2}^a)_{32}} & \dots & \vdots \\ \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i2}^a)_{11}} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial(r_i^{III})_3}{\partial(F_{i2}^a)_{31}} \end{bmatrix} \quad (64)$$

Denklem (59)'da verilen artık vektörün son kısmı \mathbf{R}_8 'in doğrusallaştırması da aşağıda verilmiştir

$$\text{Lin}\mathbf{R}_8 = \bar{\mathbf{R}}_8 + \sum \left(\frac{\partial \mathbf{R}_8}{\partial \mathbf{F}_{i2}^a} : \Delta \mathbf{F}_{i2}^a + \frac{\partial \mathbf{R}_8}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} : \Delta \mathbf{F}_{i1}^c \right). \quad (65)$$

Denklem (57)'deki tanıma bağlı olarak \mathbf{R}_8 'in türevleri

$$\frac{\partial \mathbf{R}_8}{\partial \mathbf{F}_{i2}^a} = \frac{\partial \mathbf{R}_8}{\partial \mathbf{F}_{i1}^c} = -\frac{1}{8} \mathbb{I} \quad (66)$$

olarak bulunur. Denklem (66)'da \mathbb{I} dördüncü derece birim tensörü ifade eder

$$\mathbb{I}_{ijkl} = \delta_{ik} \delta_{jl} \quad (67)$$

Yukarıdaki denklemde δ_{ik} Kronecker delta sembolüdür. Denklem (66)'nın denklem (65)'e yerleştirilmesi sonucunda

$$\text{Lin}\mathbf{R}_8 = \bar{\mathbf{R}}_8 - \frac{1}{8} \mathbb{I} : \sum (\Delta \mathbf{F}_{i2}^a + \Delta \mathbf{F}_{i1}^c) \quad (68)$$

elde edilir. Bütün denklem sisteminin doğrusallaştırılması aşağıdaki şekilde olur

$$\text{Lin } \mathbf{R} = \bar{\mathbf{R}} + \mathbb{K} : \Delta \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad (69)$$

Burada $\bar{\mathbf{R}}$ vektörü denklem (59)'a benzer şekilde $\bar{\mathbf{R}}_i$ vektörlerinden oluşur ve artık vektörün doğrusallaştırmanın yapıldığı noktadaki değerine karşılık gelir. Her bir dilimdeki deformasyon gradyan tensöründeki değişimi ifade eden $\Delta \mathbf{F}$ $9 \times 8 = 72$ satıra sahip bir kolon vektördür

$$\Delta \mathbf{F} = [\Delta \mathbf{F}_1^a \quad \Delta \mathbf{F}_1^c \quad \Delta \mathbf{F}_2^a \quad \Delta \mathbf{F}_2^c \quad \Delta \mathbf{F}_3^a \quad \Delta \mathbf{F}_3^c \quad \Delta \mathbf{F}_4^a \quad \Delta \mathbf{F}_4^c]^T \quad (70)$$

$\Delta \mathbf{F}$ vektörünü oluşturan amorf ve kristal dilimlerdeki deformasyon gradyan tensörleri de 9×1 boyutunda bir vektördür ve denklem (58)'deki gibi depolanır. Denklem (69)'daki \mathbb{K} matrisi aşağıdaki şekilde bir döngü ile oluşturulabilir

<p><i>Her bir $m = 1, 2, \dots, 8$</i> <i>Her bir $n = 1, 2, \dots, 8$</i></p> <p style="text-align: right;">$\mathbb{K}_{mn} = \mathbf{0}$</p> <p><i>Her bir $i = 1, 2, \dots, 7$</i></p> <p style="text-align: right;">$j = \Gamma_{i2}$ $\mathbb{K}_{ij} = \mathbf{a}_i$ $k = \Gamma_{i1}$ $\mathbb{K}_{ik} = \mathbf{c}_i$</p> <p><i>Her bir $i = 8$</i> <i>Her bir $j = 1, 2, \dots, 8$</i></p> <p style="text-align: right;">$\mathbb{K}_{ij} = -\frac{1}{8} \mathbb{I}$</p>	(71)
--	------

Yukarıdaki tabloda $\mathbb{K}_{ij}, i = 1..8, j = 1..8$ matrisi 72×72 boyutlu \mathbb{K} matrisini oluşturan 9×9 boyutlu alt matrislerdir.

Homojenleştirilmiş Gerilim ve Tanjantın Hesaplanması

İki fazlı yapının makroskopik gerinimi tüm dilimlerde görülen gerilmelerin hacimleri oranında ağırlıklı ortalaması olarak alınmıştır. Gerilim ölçütü olarak 1. Piola Kirchhoff gerilim tensörü kullanılmıştır.

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{2}{N} \sum_i [v^c \mathbf{P}_i^c + v^a \mathbf{P}_i^a] \quad (72)$$

Bu denklemde $\bar{\mathbf{P}}$ makroskopik 1. Piola Kirchhoff gerilim tensörü, N toplam dilim sayısını belirten homojenleştirme malzeme parametresi, \mathbf{P}_i^c ve \mathbf{P}_i^a i numaralı kristal ve amorf dilimleri

için bulunan 1. Piola Kirchhoff gerilim tensörleri, v^c ve v^a ise amorf ve kristal dilimlerin hacimsel oranlarını belirten homojenleştirme malzeme parametreleridir.

Homojenleştirme modelinin makroskopik nominal modülü denklem (72)'ye göre

$$\bar{\mathbb{A}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}} = \frac{2}{N} \sum_i \left[v^c \frac{\partial \mathbf{P}_i^c}{\partial \mathbf{F}_i^c} : \frac{\partial \mathbf{F}_i^c}{\partial \bar{\mathbf{F}}} + v^a \frac{\partial \mathbf{P}_i^a}{\partial \mathbf{F}_i^a} : \frac{\partial \mathbf{F}_i^a}{\partial \bar{\mathbf{F}}} \right] \quad (73)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Bu denklemdeki $\frac{\partial \mathbf{P}_i^c}{\partial \mathbf{F}_i^c}$ ve $\frac{\partial \mathbf{P}_i^a}{\partial \mathbf{F}_i^a}$ ifadeleri sırasıyla kristal ve amorf malzeme modellerinin algoritmik tanjant modülleridir. Yukarıdaki denklemde $\frac{\partial \mathbf{F}_i^c}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$ ve $\frac{\partial \mathbf{F}_i^a}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$ dördüncü dereceden tensörleri sayısal olarak sekant yaklaşımı

$$\left(\frac{\partial \mathbf{F}_i^c}{\partial \bar{\mathbf{F}}} \right)_{IJKL} \cong \frac{[(\mathbf{F}_i^c)_{k+1} - (\mathbf{F}_i^c)_k]_{IJ}}{[\bar{\mathbf{F}}_{k+1} - \bar{\mathbf{F}}_k]_{KL}} \quad (74)$$

ile hesaplanmıştır. Denklem (74)'te k indisleri iterasyon numarasını, $IJKL$ indisleri ise tensör bileşeni indisleridir. Sekant koşulunu sağlayan hesaplama yöntemi olarak Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) quasi – Newton yöntemi algoritmasının Hessian yakınsama denklemi kullanılmıştır. Sıklıkla kullanılan BFGS algoritması Hessian yakınsama denklemi, skalar değerli bir $f(x)$ vektör fonksiyonu için

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \quad (75)$$

biçiminde verilir (Nocedal ve Wright, 1999). Bu denklemde, alt indisler iterasyon numarasıdır. B ikinci dereceden bir tensör olup $f(x)$ fonksiyonunun x vektörüne göre ikinci dereceden türevi iken, s_k ve y_k ise aşağıda verildiği gibi birer vektör olup, sırasıyla, iki iterasyon arasında x vektörleri arasındaki fark ve $f(x)$ fonksiyonunun x vektörüne göre türevlerinin arasındaki farktır:

$$s_k = x_{k+1} - x_k \quad y_k = \frac{\partial f(x_{k+1})}{\partial x_{k+1}} - \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_k} \quad (76)$$

Denklem (75)'te verilen, birinci türevlere göre fonksiyonun ikinci türevini hesaplayan BFGS denkleminin sağladığı yaklaşık modüllerin sekant koşulunu

$$B_{k+1} s_k = y_k \quad (77)$$

her zaman sağladıkları Denklem (75)'in s_k vektörü ile sağdan vektör çarpımı ile görülebilir.

Ancak BFGS formülü bu haliyle hesaplanması amaçlanan dördüncü dereceden $\frac{\partial \mathbf{F}_i^c}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$ ve $\frac{\partial \mathbf{F}_i^a}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$

tenzörleri için kullanılamaz. Örneğin $\frac{\partial F_i^c}{\partial \bar{F}}$ ifadesinin yaklaşık hesaplanması problemi için, s_k ve y_k birer ikinci dereceden tenzör iken

$$s_k = \bar{F}_{k+1} - \bar{F}_k \quad y_k = (F_i^c)_{k+1} - (F_i^c)_k \quad (78)$$

B_{k+1} hesaplamak istediğimiz dördüncü dereceden tenzördür.

$$B_{k+1} = \frac{\partial F_i^c}{\partial \bar{F}} \quad (79)$$

BFGS ifadesini elimizdeki problem ile uyumlu olacak biçimde 4. dereceden B ve 2. dereceden s_k ile y_k tenzörleri için yazılabileceği

$$B_{k+1} = B_k - \frac{(B_k : s_k) \otimes (B_k : s_k)}{s_k : B_k : s_k} + \frac{y_k \otimes y_k}{y_k : s_k} \quad (80)$$

ve bu denklemin de

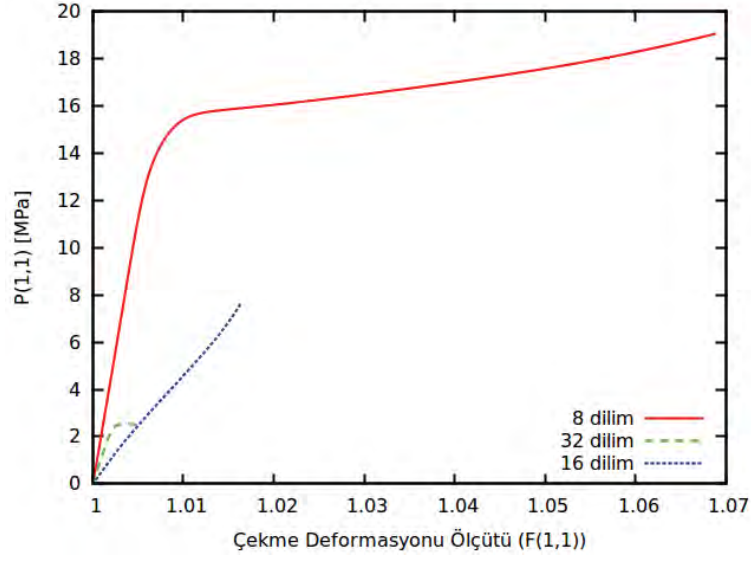
$$B_{k+1} : s_k = y_k \quad (81)$$

ile ifade edilebilecek sekant koşulunu her zaman sağlayabildiği görülmüştür.

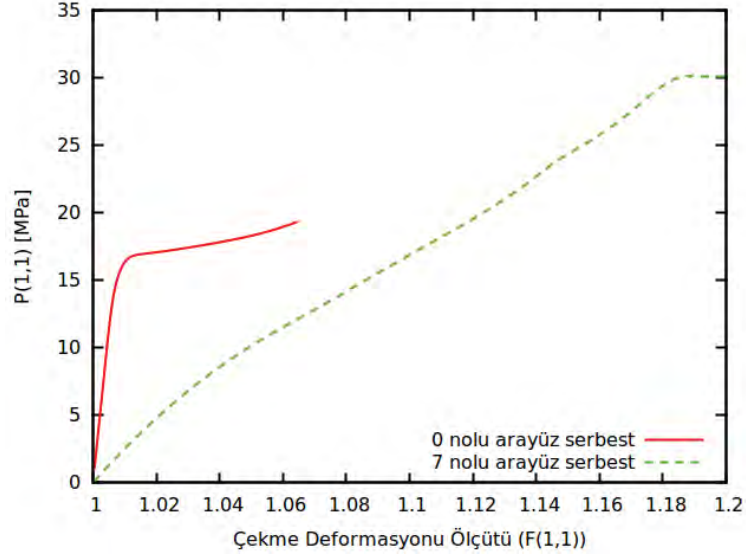
Tek Eksenli Çekme Analizleri

Denklem (72) ve Denklem (71)'de verilen gerilim ve modülü ifadeleri kullanılarak, malzeme noktasındaki tek eksenli çekme analizleri yapılmıştır. Farklı dilim sayısı kullanılarak yapılan analizlerden elde edilen gerinim-gerilim eğrileri Şekil 42'deki gibidir. Şekil 41'de dört amorf ve dört kristal dilimden oluşan sekiz dilimli idealize edilmiş küresel mikro-yapı gösterilmektedir.

Şekil 42'de görüleceği üzere farklı dilim sayısı kullanılarak elde edilen gerinim gerilim eğrileri bir eğriye tekdüze olarak yakınsamamaktadırlar. Bu durumun bir arayüzde uyumluluk koşullarının sağlanmamasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Şekil 41'de mikro-yapı için kullanılan arayüz ve dilim numaralandırma konvansiyonu verilmiştir. Şekilde C kristal fazı, A harfi amorf fazı, i harfi ise arayüzü göstermektedir. Şekil 43'te 8 dilimli analiz için, 0 numaralı ve 7 numaralı arayüz serbest bırakıldığı durumlarda elde edilen gerinim-gerilim eğrileri birlikte görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi sonuçlar seçilen arayüze bağlı olarak ciddi şekilde değişmektedir.



Şekil 42. Son ara yüzleri serbest bırakılan farklı dilim sayısına sahip analizlerin gerilim – gerinim eğrileri



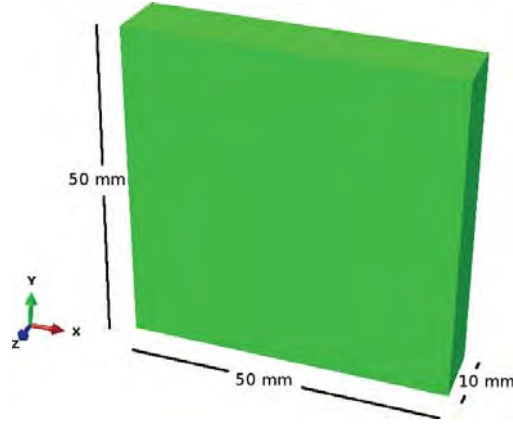
Şekil 43. Son arayüz ve ilk arayüzün serbest bırakıldığı modellerin tek eksenli çekme yüklemesi gerilim-gerinim eğrilerinin karşılaştırması

Çok ölçekli modelin makroskopik davranışı uyumluluk koşulları görmezden gelinen arayüzün yükleme doğrultusuna göre olan konumuna bağlıdır. Fiziksel bir karşılığı bulunmayan bu bağılıktan ötürü, bir ara yüzün serbest bırakılması yaklaşımı kullanılamamaktadır. Tüm arayüzlerdeki uyumluluk koşullarının yerine getirilmesi koşulu ancak belirli özel şartları sağlayan makroskopik deformasyon gradyan tensörleri için çözülebilmektedir. Bu koşullara örnek olarak hacimsel deformasyonun hacim korunumlu deformasyona göre büyük olması verilebilir. Değerlendirilen bir diğer teknik 4. Gelişme raporunda verilmiştir: Bir arayüzü

tamamen serbest bırakmak yerine bir kaç arayüzde aksak uyumluluk koşulu kombinasyonlarının kullanımı denenmiştir. Ancak 4. Gelişme raporunda B.1. nolu bölümünde belirtildiği üzere bu yaklaşımla da tutarlı makroskopik sonuçlar alınamamıştır. İleride, burada önerilen mikro yapı için, arayüzler arasındaki uyum koşulları ve makroskopik homojenizasyon probleminin Danielsson vd. (2001)'deki gibi periyodik sınır koşullarını kullanan özel bir sonlu elemanlar yöntemi tekniği ile çözülmesini içeren bir hacim elemanının geliştirilmesi düşünülmektedir. Böylesi bir modelde, fazlar arası uyum koşulları, momentumun korunumu kanununca ve düğüm noktalarının uyumu ile dikte edilirken, bu koşulları sağlayan konfigürasyon sonlu elemanlar yönteminin artıkların toplamının sıfır olması yaklaşımı ile bulunacaktır. Ancak, tarif edilen yöntemin kodlamasına başlamanın projenin hedefleri açısından riskli olacağı kanaatiyle, önce benzer bir yapının konvansiyonel sonlu elemanlar yöntemi ile araştırılmasına karar verilmiştir. Bölüm 3.3'te ileride basitleştirilerek malzeme modeline çevirilmesi düşünülen böylesi bir yapının çözülebilirliği, davranışı ve öngörücülük performansı, yüksek sayıda sonlu eleman kullanılarak konvansiyonel sonlu elemanlar yöntemi ile araştırılmıştır.

3.3. Küresel Mikro-Yapının Sonlu Eleman Analizleri

Proje kapsamında çok ölçekli malzeme modelinin geliştirilmesine paralel olarak küresel mikro-yapının sonlu eleman analizleri yapılmıştır. Küresel mikro-yapı amorf ve kristal fazlara ait dilimlerden oluşan ince bir dikdörtgen prizma şeklinde idealize edilmiştir. Bu çalışmada temel olarak iki tip analiz yapılmıştır. İlk tipte, küresel mikro-yapıdaki dilim sayısının değişiminin basit kesme, çekme ve basma yüklemeleri için etkisi incelenmiş; ikinci tipte ise küresel mikro-yapı boyutunun aynı yükleme koşulları altındaki malzeme davranışına etkisi incelenmiştir. Analizler Şekil 44'te görülen modelin farklı dilim sayılarına sahip bir adet küresel mikro-yapıyı içerdiği durum için ya da bu hacmin birden çok küresel mikro-yapıya bölünmesi ile elde edilen durum için yapılmıştır. Tüm analizlerde yükleme hızı sabit olarak alınmış olup 1000 saniyede deformasyon gradyan tensörünün yükleme yönündeki bileşeni bir artmaktadır.



Şekil 44. Tüm sonlu elemanlar analizlerinde kullanılan kare kesitli dikdörtgenler prizması şeklindeki model ve boyutları

Analizlerdeki malzeme parametreleri, literatürde yoğun şekilde çalışılmış olan yüksek yoğunluklu polietilen ile uyumlu olacak şekilde van Dommelen vd. (2003)'te verilen parametrelere yakın olarak Tablo 7'deki gibi alınmıştır.

Tablo 7. Analizlerde kullanılan malzeme parametreleri

		Amorf faz				Kristal faz		
κ	μ	N	U	q	p	$\dot{\gamma}_0$	τ	n
[MPa]	[MPa]					[s ⁻¹]	[MPa]	
2000	35	49	6.22	0.10	2.0	1x10 ⁻³	8.0	9

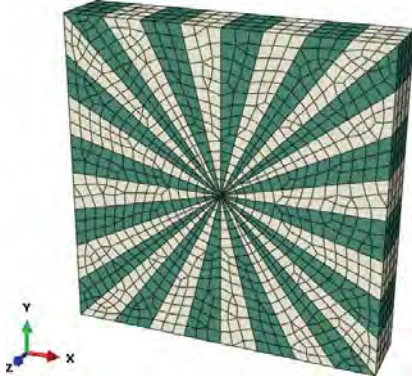
Kristal fazın kayma sistemleri ve göreceli kayma dirençleri ile elastisite modülleri Tablo 4 ve Tablo 5'teki belirtilmiştir.

Dilimlerin küresel mikro-yapı merkez noktasında birleşmesinden ötürü, ağ oluşturulmasında kama ve tuğla şeklindeki elemanlar birlikte kullanılmıştır. Tüm analizlerde, tuğla şeklindeki elemanlar için ABAQUS kütüphanesinde yer alan C3D20R ve kama biçimindeki elemanlar için C3D15 tipi eleman kullanılmıştır. Her iki eleman tipi de ikinci dereceden interpolasyon formülleri (shape functions) kullanmakta olup, C3D20R indirgenmiş Gauss integrasyonu (reduced integration) yöntemini kullanmaktadır.

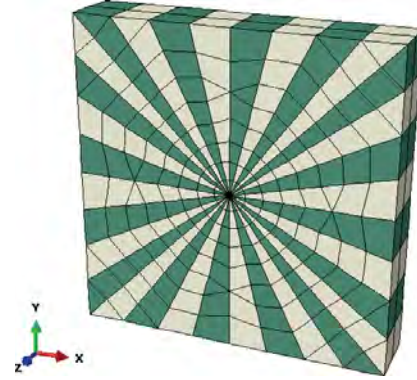
3.3.1. Küresel Mikro-Yapıdaki Dilim Sayısının Etkisini İnceleyen Analizler Çözüm Ağları

Ağ yakınsama analizi olarak 32 dilimli küresel mikro-yapının kesme analizi Şekil 45 ve Şekil 46'da verilen sırasıyla 4512 ve 560 adet eleman içeren ağ yapıları ile çözülmüştür. Şekil

47'da verilen analiz sonuçlarından 560 adet eleman kullanan ağın yeterince hassas olduğu görülmüştür.

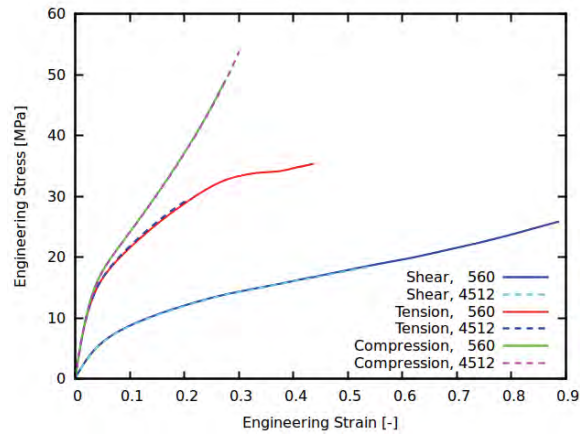


Şekil 45. 32 dilimli küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 4512 adet sonlu elemandan oluşan ağ

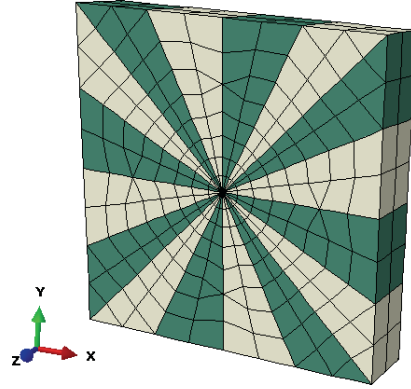


Şekil 46. 32 dilimli küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 560 adet sonlu elemandan oluşan ağ

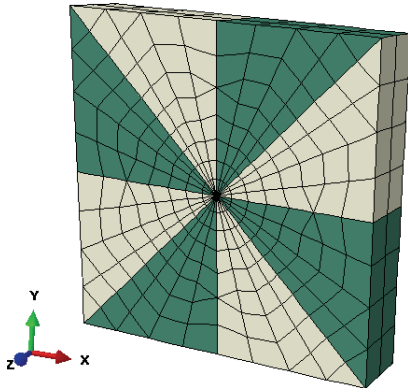
Şekil 46'da verilen 32 dilimli modelin çözüm ağı bu kısımdaki analizlerde temel alınmıştır. Koyu renk ile gösterilen dilimlere amorf malzeme, açık renk ile gösterilen dilimlere ise kristal malzeme modeli atanmıştır. Değerlendirilmesi amaçlanan diğer dilim sayıları olan 16, 8 ve 4 adet dilim için de; aynı ağda, bitişik olan sırasıyla 2, 4 ve 8 dilime aynı malzeme modeli atanarak, Şekil 48, Şekil 49 ve Şekil 50'de gösterilen modeller elde edilmiştir. Dilim sayısının etkisi için sonuçları kıyaslanacak tüm analizlerde, aynı sonlu elemanlar ağı kullanılmasıyla sonuçlar üzerinde ağ yapısından kaynaklanan etkilerin en aza indirilmesi amaçlanmıştır.



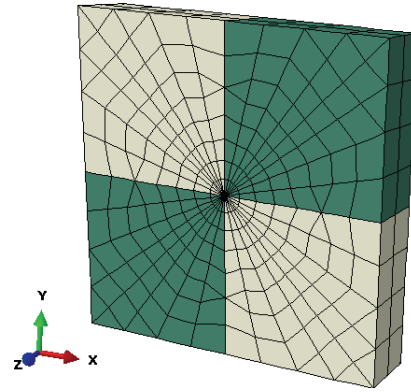
Şekil 47. Şekil 45 ve Şekil 46'daki ağ yapıları ile çözülen 32 dilimli küresel mikro-yapının basit çekme, basma ve kesme yüklemeleri sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



Şekil 48. 16 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.



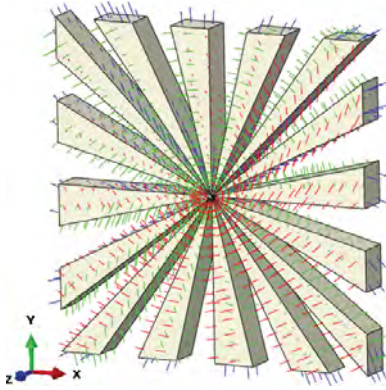
Şekil 49. 8 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.



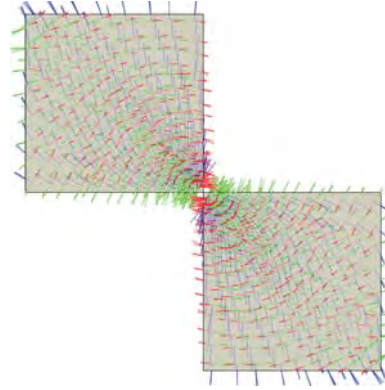
Şekil 50. 4 dilimli küresel mikro-yapının tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.

Analizlerde kullanılan kristal visko-plastisitesi modeli eşyönlü olmayan bir malzeme modeli olduğundan atandığı integrasyon noktalarında kristal yöneliminin tanımlanması gerekmektedir. Bu durumda her integrasyon noktasına, o noktanın koordinatlarına göre hesaplanan farklı bir koordinat sistemi atanmış olup, bu koordinat sistemini global koordinat sistemine eşleyen dönme tensörleri ile, şekil değiştirme gradyan tensörünün yeni koordinat sistemine göre malzeme modeline verilmesi işlemleri ABAQUS programı tarafından yerine getirilmektedir. Malzeme parametreleri kullanılan HDPE kristalinin kafes parametreleri $a = 7.4\text{Å}$, $b = 4.9\text{Å}$, $c = 2.5\text{Å}$ (G'Sell ve Dahoun, 1994) olup kristal ortorombiktir. Diğer yönlere göre çok daha kuvvetli olan zincir yönü, c doğrultusundadır. Elemanların integrasyon noktalarına atanan kristal yerleşimlerinin, (i) küresel mikro-yapıda kristal lamel büyüme yönünün merkezden itibaren radyal yönde b doğrultusu olması (Uchida ve Tada, 2013) ve (ii) amorf faz ile kristal lamel arayüzünün, kristalin $\{201\}$ yüzeyi olması koşullarını sağlaması hedeflenmiştir (Gautam vd., 2000). Bu durum kristal fazdaki polimer zincirlerinin lamel yüzey normali ile yaklaşık 35° lik bir açı yapmasına karşılık gelmektedir.

ABAQUS içerisinde küresel mikro-yapı merkezini orijin kabul eden silindirik bir koordinat sistemine göre yönelimler tanımlanarak, kristalin merkezinden radyal doğrultuda b yönünde büyüdüğü koşul modellenmiştir. Amorf faz dilimleri ile kristal faz dilimlerinin arayüzlerinin lamelin $\{201\}$ yüzeyi olması koşulunu sağlamak amacıyla, atanan yönelim, b eksenine etrafında döndürülerek c zincir yönünün arayüz normal vektörü ile 35° lik açı yapması sağlanmıştır (van Dommelen vd., 2003). Eleman integrasyon noktalarına atanan yönelimler 32 ve 4 dilimli küresel mikro-yapılar için Şekil 51 ve Şekil 52’de verilmiştir. 16 ve 8 dilimli küresel mikro-yapılar için kullanılan yönelimler de benzer şekilde tanımlanmıştır.



Şekil 51. 32 dilimli küresel mikro-yapı analizleri için kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin a yönünü, mavi doğrular b yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan c yönünü göstermektedir.



Şekil 52. 4 dilimli küresel mikro-yapı analizleri için kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin a yönünü, mavi doğrular b yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan c yönünü göstermektedir.

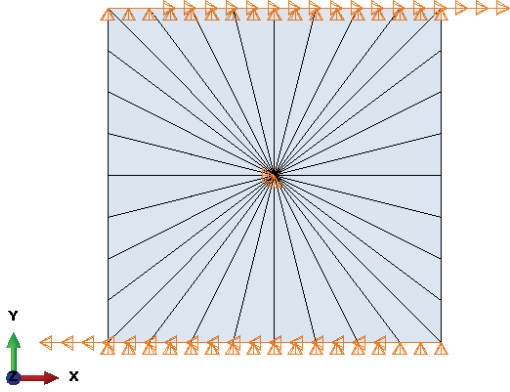
Sınır Koşulları

Modelin, implementasyonu planlanan homojenleştirme yöntemi ile uyumlu olmakla birlikte, makul karmaşıklıkta olması amacıyla, 50 mm x 50 mm x 10 mm boyutlarındaki kare kesitli bir dikdörtgenler prizması kullanılmıştır. Kesitin daire yerine kare olarak seçilmesinin sebebi yükleme sınır koşullarının konvansiyonel olarak homojen şekilde atanabilmesidir.

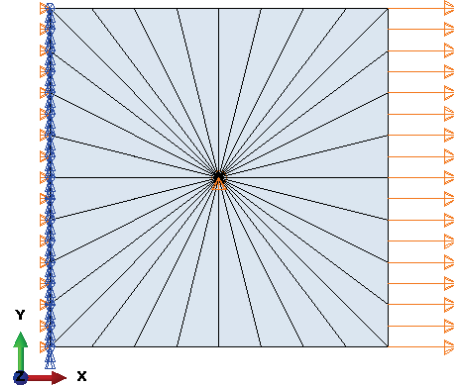
Basit kesme analizlerinde; dilimlerin birleşme noktası olan küresel mikro-yapı merkez noktasından kalınlık boyunca geçen doğru boyunca yer alan tüm düğüm noktalarının x ve y yönlerinde deformasyonlarına izin verilmemiş, bu doğrunun orta noktasında yer alan bir adet düğüm noktası ise ek olarak z yönünde de sabit tutulmuştur. Kare kesitli geometrinin Şekil 53’te gösterildiği gibi alt ve üst yüzeylerine birbirlerine zıt yönlerde x doğrultusunda deformasyon uygulanmış, y yönündeki deformasyonları ise engellenmiştir.

Basit çekme analizlerinde; küresel mikro-yapı merkez noktasından kalınlık boyunca geçen doğru boyunca yer alan tüm düğüm noktaları y yönünde sabitlenmiş, doğrunun orta noktasında yer alan bir adet düğüm noktası ise ek olarak z yönünde de sabit tutulmuştur.

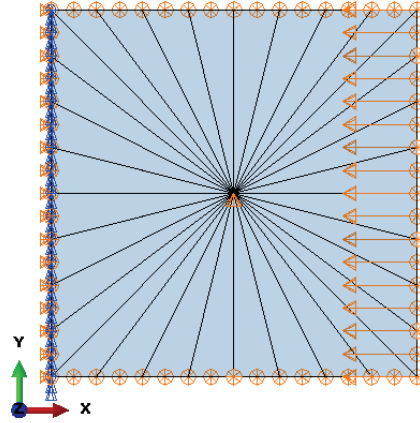
Şekil 54'te görüldüğü gibi yan yüzeylerden biri x doğrultusunda sabit tutulurken diğerine yine x yönünde deformasyon uygulanmıştır.



Şekil 53. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit kesme analizlerinin sınır koşulları



Şekil 54. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit çekme analizlerinin sınır koşulları



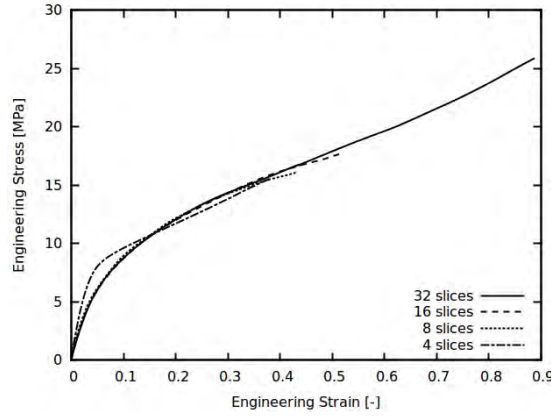
Şekil 55. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapılar için oluşturulan basit basma analizlerinin sınır koşulları

Basit basma analizlerinde; küresel mikro-yapı merkez noktasından kalınlık boyunca geçen doğru boyunca yer alan tüm düğüm noktaları y yönünde sabitlenmiş; Şekil 55'te görüldüğü gibi yan yüzeylerden biri x yönünde sabit tutulurken diğerine x doğrultusunda deformasyon uygulanmıştır. Ayrıca burkulmanın önüne geçmek için, kalınlık boyunca küresel mikro-yapının dış yüzeyinin tam orta noktasında bulunan noktaların z yönündeki deformasyonuna izin verilmemiştir. Bu son sınır koşulunun uygulanmadığı durumlarda yapıda burkulma oluşmuştur.

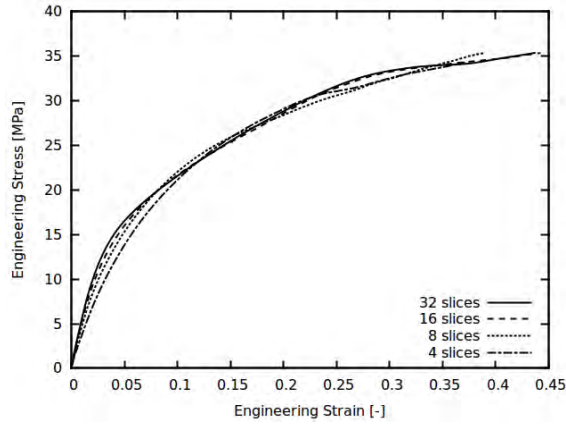
Analiz Sonuçları

Küresel mikro-yapının 4, 8, 16 ve 32 adet faz dilimlerine ayrılmış halinin basit kesme, basit çekme ve basit basma sınır koşulları ile çözülen sonlu elemanlar analizlerinin gerilim–gerinim

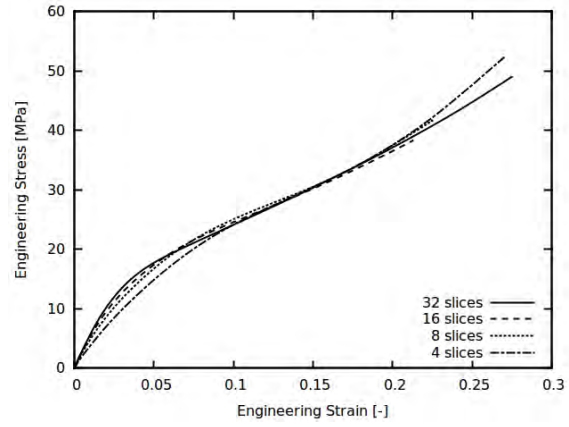
eğrileri sırasıyla Şekil 56, Şekil 57 ve Şekil 58'de verilmiştir. Tüm yükleme koşulları için dilim sayısı arttıkça daha sert davranış görülmüştür. Bu eğilimi sadece 4 dilim için uygulanan kesme analizi sonucu bozmaktadır. Dilim sayısı arttıkça analizlerin yük-şekil değiştirme eğrileri birbirlerine yakınsamaktadır. Şekil 58'de verilen, basma yüklemesinde görülen deformasyona bağlı sertleşmenin nedeni, belirli kristal dilimlerinin kristal oryantasyonlarının basma yüklemesi altında malzemenin deformasyon direncini artıracak şekilde değişmesidir.



Şekil 56. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu eleman analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



Şekil 57. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu eleman analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



Şekil 58. Farklı dilim sayılarına sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu eleman analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri

Küresel mikro-yapıyı oluşturan amorf ve kristal fazların verilen şekil değiştirmeyi ne şekilde paylaştıklarını görmek amacıyla seçilen analizlerin, analiz sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağları ve von Mises gerilim dağılımları da incelenmiştir.

Küresel mikro-yapı bünyesindeki dilim sayısının etkisini inceleyen analizler arasından seçilen 16 dilimli analiz için şekil değiştirmemiş model görünümü Şekil 59'da verilmiştir. Kristal dilimleri,

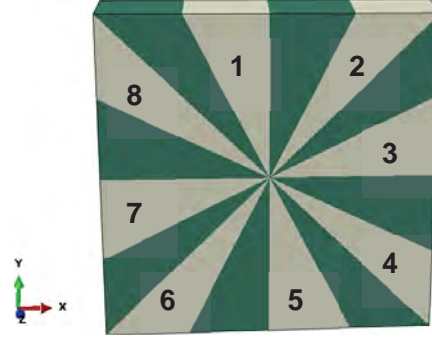
Şekil 59'da ileride referans verilmek üzere numaralandırılmıştır. Analizlerin kesme, çekme ve basma sınır koşulları için olan şekil değiştirmiş ağ görünümleri ile von Mises gerilimlerinin dağılımları Şekil 60 - Şekil 65'te verilmiştir.

Her üç yükleme koşulu için; hemen tüm kristal dilimlerinde şekil değiştirmiş görümlere de yansıdığı üzere, lokal gerilim birikimleri gözlenmiştir. En yüksek gerilimler beklendiği üzere, elastisite parametreleri amorf faza göre çok daha yüksek olarak alınan kristal fazda görülmektedir.

Şekil 61'de kesme yüklemesi için en yüksek gerilimlerin zincir yönünün yükleme doğrultusuyla en fazla örtüştüğü 1 ve 5 numaralı kristal dilimlerinde oluştuğu görülmüştür. Bunda zincir yönündeki deformasyon için olan elastik modülünün (C_{33}) Tablo 5'de verildiği gibi diğer yönlere göre 10 kat daha yüksek alınmasının etkisi bulunmaktadır.

Şekil 63'te, çekme yüklemesi için şekil değiştirmeye karşı en büyük gerilimlerin 1, 2, 5 ve 6 numaralı kristal dilimlerinde oluştuğu gözlenmiştir. Ayrıca 3 ve 7 numaralı kristal dilimlerinde deformasyona karşı oluşan gerilimlerin, kristal faza oranla çok daha düşük elastisite modül değerine sahip amorf faz dilimlerinden dahi daha düşük olduğu görülmüştür. 4 ve 8 numaralı kristal dilimleri de görece düşük gerilim direnci göstermektedir. Bu dört dilimin ortak noktası zincir doğrultusunun yükleme doğrultusuna hemen hemen dik olması; dolayısı ile zincir doğrultusunun yüksek olan elastik modülünün etkisinden bu dilimlerin yükleme yönünde yararlanamamaktadır. Tüm amorf faz dilimlerinde birbirine yakın gerilim miktarları görülmektedir.

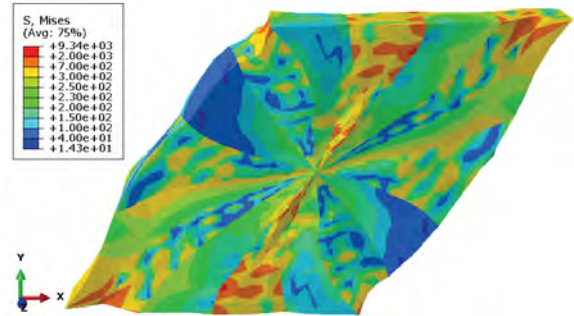
Basma yüklemesi için, şekil değiştirmeye karşı en düşük gerilimler, bu bölümde aynı yöndeki çekme yüklemesi için açıklandığı sebepten ötürü yine 3 ve 7 numaralı kristal dilimlerinde oluşmaktadır. Diğer tüm kristal dilimlerinde yüksek gerilim birikimleri görülmektedir. Bu yüklemede dikkate değer bir nokta, çekme yüklemesi altında görece düşük gerilim değerlerinin elde edildiği 4 ve 8 numaralı dilimlerin, basma yüklemesi için en yüksek gerilimlerin elde edildiği dilimler olmasıdır. Bu dilimlerde çekme ve basma yüklemelerinde oluşan davranış farkı, modelin şekil değiştirmeden kaynaklanan doğrusal olmayan etkileri de göz önüne alınmasından kaynaklanmaktadır. Öyle ki, çekme yüklemesi için, deformasyon seviyesi arttıkça 4 ve 8 numaralı kristal dilimlerinin yönelimleri deformasyona karşı düşük direnç gösteren 3 ve 7 numaralı dilimlerin yönelimlerine yakınsamaktadır; halbuki basma yüklemesi durumunda, deformasyon seviyesi arttıkça aynı dilimlerin yönelimleri yüksek direnç gösteren 1 ve 5 numaralı dilimlerin yönelimlerine yakınsamakta ve bu sebeple şekil değiştirmeye karşı gösterdikleri gerilim seviyeleri artmaktadır.



Şekil 59. 16 dilimli küresel mikro-yapının şekil değiştirmemiş model görünümü. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



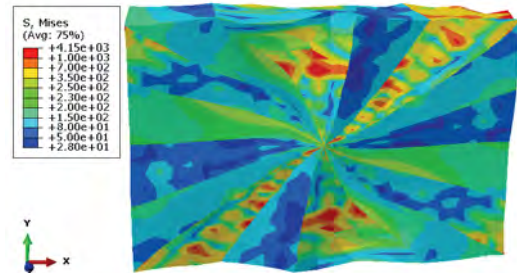
Şekil 60. 16 dilimli küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



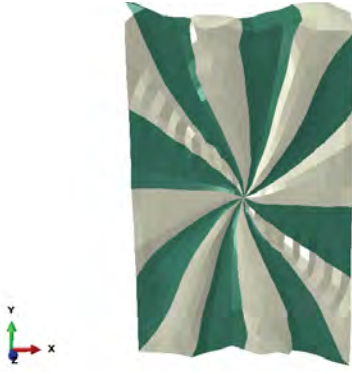
Şekil 61. 16 dilimli küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.



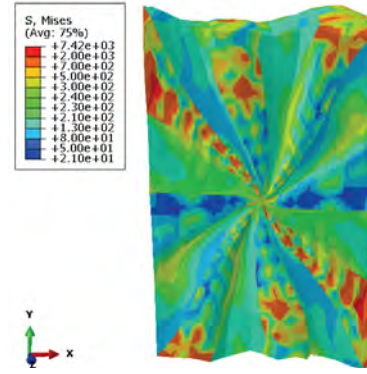
Şekil 62. 16 dilimli küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 63. 16 dilimli küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.

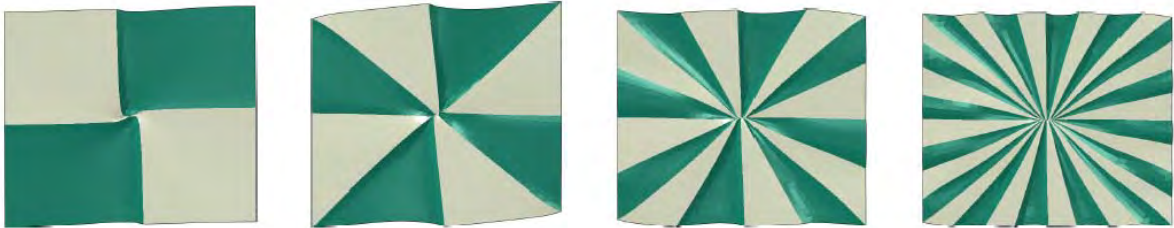


Şekil 64. 16 dilimli küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.

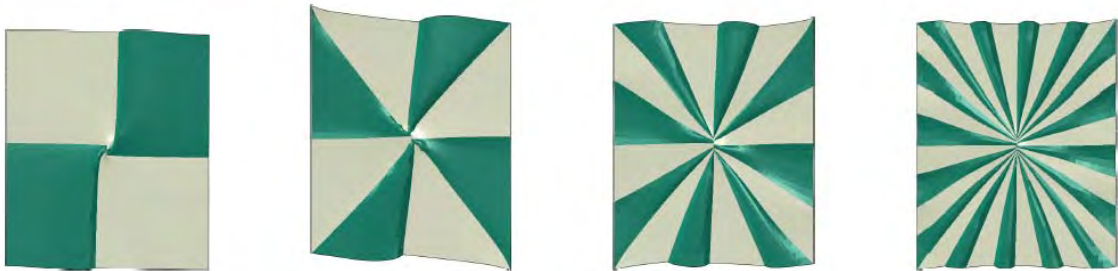


Şekil 65. 16 dilimli küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.

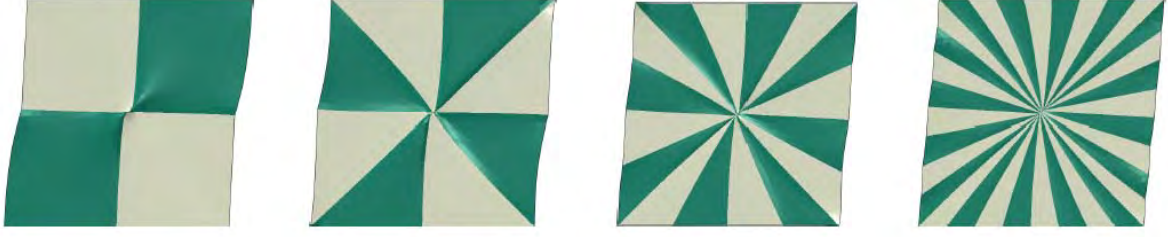
Şekil 66-Şekil 68 arasında üç farklı yükleme (çekme, basma ve kesme) için 1% makroskopik gerinim seviyesindeki küresel mikro-yapılar gösterilmiştir. Şekil değişimine uğramış mikro-yapılar, mikro-yapının 4, 8, 16 ve 32 dilimden oluştuğu her dört durum için de gösterilmiştir. Şekil 66-Şekil 68 arasında deformasyonlar yaklaşık 10 kat kadar büyütülmüştür. Şekil değiştirmenin büyük bir kısmının amorf dilimler tarafından karşılandığı özellikle dört dilimli mikro-yapılardan açıkça gözükmektedir. Kristal fazın elastik sertliğinin amorf faza göre çok yüksek olmasından dolayı şekil değiştirmelerin bu şekilde dağılması beklenen bir durumdur.



Şekil 66. Basit çekme analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.

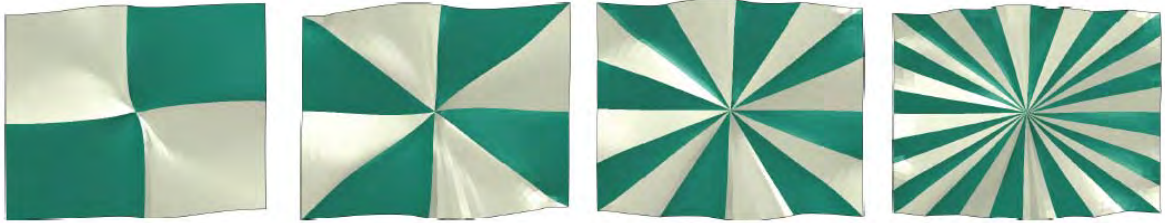


Şekil 67. Basit basma analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 68. Basit kesme analizlerinde 1% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler yaklaşık olarak 10 kat büyütülmüştür. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.

Makroskopik gerinim seviyesinin 20% olduğu durumdaki şekil değiştirmiş mikro-yapılar Şekil 69-Şekil 71'de verilmiştir. Önceki üç şekle paralel olarak deforme olmuş mikro-yapılar, mikro-yapının 4, 8, 16 ve 32 dilimden oluştuğu her dört durum için de gösterilmiştir. Makroskopik gerinim seviyesi yeteri kadar büyük olduğu için Şekil 69-Şekil 71'de deformasyonlar büyütülmemiştir. Gerinim seviyesinin 1% olduğu durumdan farklı olarak Şekil 69-Şekil 71'de kristal fazında plastik kaymanın etkisiyle gözle görülür oranda deformasyona uğradığı görülmektedir. Kristal faz düşük gerinim seviyelerinde amorf fazdan çok sert olsa da artan gerinim seviyelerinde amorf fazın sertleşmesine ve plastik kaymaların etkisiyle aralarındaki sertlik farkı azalmaktadır.



Şekil 69. Basit çekme analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



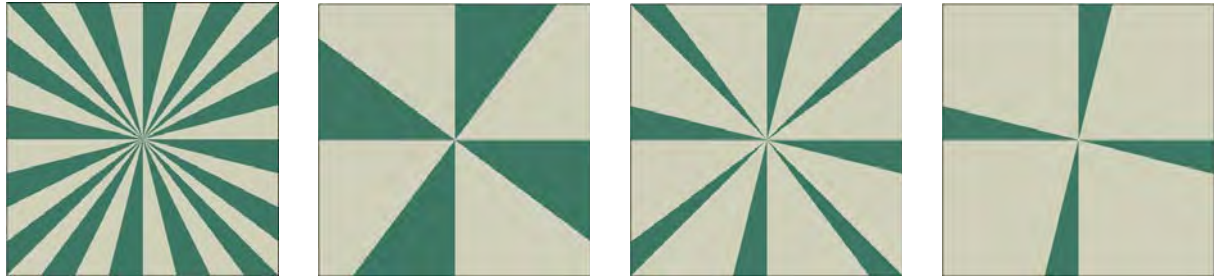
Şekil 70. Basit basma analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 71. Basit kesme analizlerinde 20% mühendislik gerinimine karşılık gelen 4, 8, 16 ve 32 dilim sayılarına sahip şekil değiştirmiş mikro-yapılar. Şekil değiştirmeler büyütülmemiştir. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.

Kristallik Oranının Etkileri

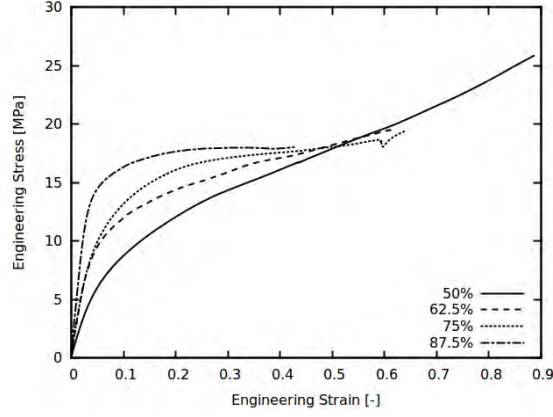
Bu kısımda farklı kristallik oranlarına sahip tek bir küresel mikro-yapının sonlu eleman analizleri yapılmış ve kristallik oranının malzemenin mekanik davranışına olan etkisi incelenmiştir. Şekil 72'de gösterildiği gibi 50%, 62.5%, 75% ve 87.5% olmak üzere dört farklı kristallik oranı basit çekme, basit basma ve basit kesme yük koşulları altında incelenmiştir. Bu analizlerin hepsi Şekil 46'da verilen çözüm ağı kullanılarak yapılmıştır.



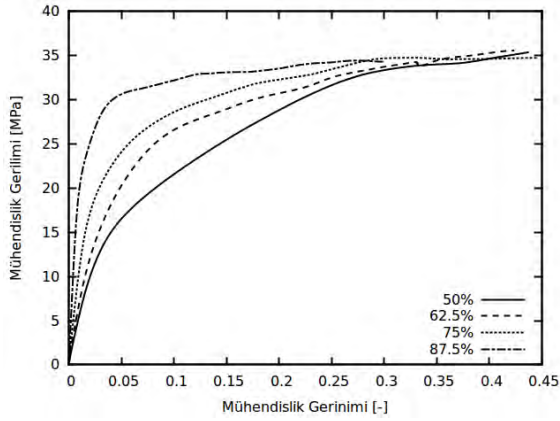
Şekil 72. Kristallik oranı etkilerini incelemek için kullanılan 50%, 62.5%, 75% ve 87.5% kristallik oranlarına sahip tek küresel mikro-yapı modelleri

Basit kesme, basit çekme ve basit basma yüklemelerinin sonucunda farklı kristallik oranlarına sahip mikro-yapılardan elde edilen ortalama gerilim-gerinim eğrileri Şekil 73, Şekil 74 ve Şekil 75'te verilmiştir. Bütün analizlerde kristallik oranı arttıkça yüklemenin başlangıcındaki elastik sertliğin (gerilim-gerinim eğrilerinin tanjantları) literatüre uygun şekilde arttığı gözlemlenmiştir. Yapılan analiz sonuçlarına göre elastik sertliğin kristallik oranı ile değişimi Şekil 76'da literatürdeki deneysel bir sonuç ile (Crist vd., 1989) kıyaslanmıştır. Kristallik oranının akma gerilimini nasıl etkilediği Şekil 77'de gösterilmiştir. Hem deneyde hem de analiz sonuçlarında akma gerilmesi gerilim-gerinim eğrisine yüklemenin başında ve

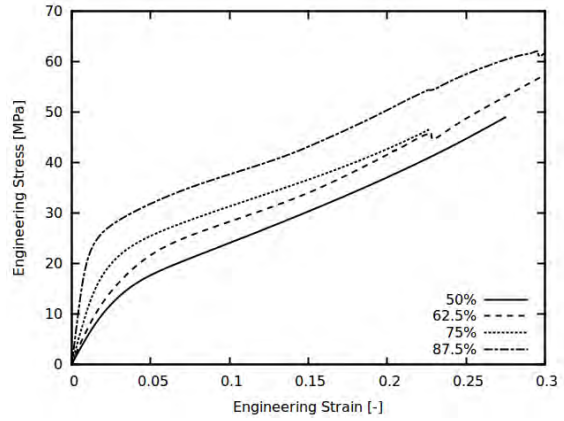
plastik kısımda çizilen iki tanjantın kesişimi olarak tanımlanmıştır. Şekil 77’de gözüktüğü gibi analiz sonuçları literatürdeki deney sonuçları (Crist ve ark. 1989) ile uyumludur.



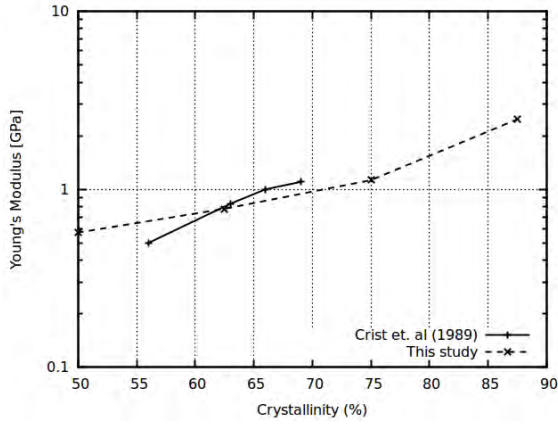
Şekil 73. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



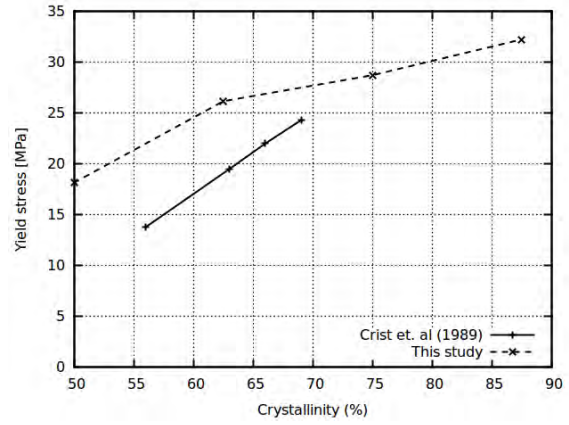
Şekil 74. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



Şekil 75. Farklı kristallik oranlarına sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



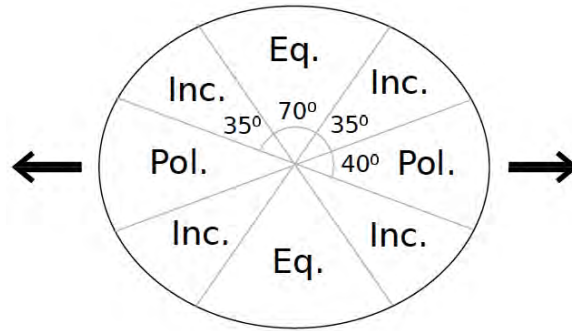
Şekil 76. Basit çekme analizleri ile elde edilen yüklemeye başındaki elastik sertliğin kristallik oranıyla değişiminin Crist vd. (1989) deneysel sonuçları ile kıyaslanması



Şekil 77. Basit çekme analizleri ile elde edilen akma geriliminin kristallik oranıyla değişiminin Crist vd. (1989) deneysel sonuçları ile kıyaslanması

Farklı Yükleme Durumlarında Kayma Sistemi Aktiviteleri

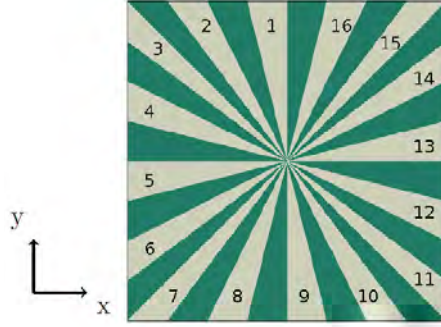
Bu kısımda bir tek küresel mikro-yapıdaki kristal bölgelerin basit çekme, basit basma ve basit kayma testlerinde ne tarzda kayma aktiviteleri gösterdiği literatürdeki deneysel çalışmalarla kıyaslanarak verilecektir. Şekil 78'de ekvatorial, polar ve eğimli bölgelerdeki kristal fazın göreceli olarak küresel mikro-yapı üzerinde yerleşimi gösterilmiştir. Ekvatorial bölge çekme yönüne dik olan dilimleri, polar bölge ise çekme yönüne paralel olan dilimleri ifade etmektedir. Eğimli bölgeler ise ekvatorial ve polar bölgelerin arasında kalan dilimlere karşılık gelmektedir.



Şekil 78. Çekme eksenine göreceli olarak ekvatorial, polar ve eğimli bölgelerin küresel mikro-yapı üzerinde gösterimi

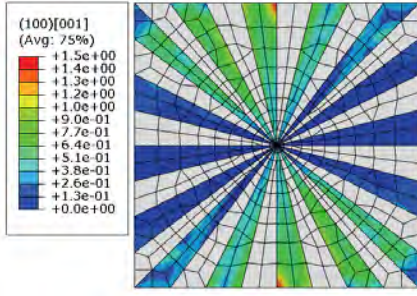
Sonlu eleman analizlerinde kullanılan idealize edilmiş mikro-yapıdaki kristal faza sahip olan dilimlerin numaralandırılması Şekil 79'da gösterilmiştir. Bu şekilde çekme yönü x-eksenine paraleldir. Bu numaralandırmaya göre 1, 8, 9 ve 16 numaralı dilimler ekvatorial bölgeye, 5 ve

13 numaralı dilimler ise polar bölgeye karşılık gelmektedir. Bunların dışında kalan dilimler ise eğimli bölgede bulunan kristal dilimlerdir.

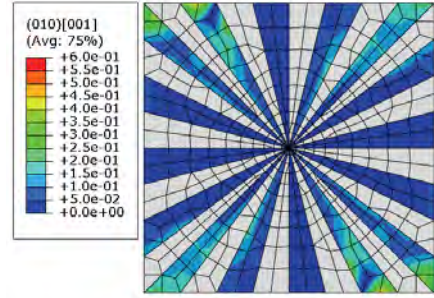


Şekil 79. Kristal dilimlerin numaralandırma sistemi. x-ekseni çekme testlerindeki çekme yönünü göstermektedir.

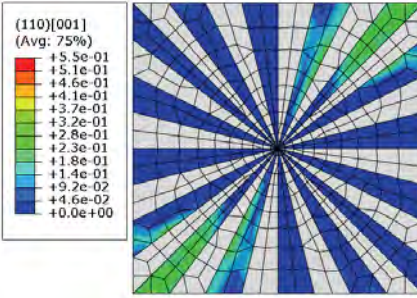
Şekil 80'de basit çekme testi için sekiz farklı kayma sistemindeki plastik kayma dağılımları verilmiştir. Şekildeki ilk dört figür zincir yönündeki kayma sistemlerine daha sonraki dört figür ise zincir yönüne dik yöndeki kayma sistemlerine karşı gelmektedir. (100)[001] kayma sisteminin aktivitesinin verildiği Şekil 80(a)'da ekvatorial bölge dilimlerinde yüksek aktivite görülmekte, aktivite miktarı polar dilimlere yaklaştıkça düşmektedir. (010)[001] kayma sistemi için Şekil 80(b)'de eğimli bölge dilimlerinde bir miktar aktivite görülmektedir. Şekil 80(a) ve (b) için belirtilen gözlemler Hay ve Keller (1965)'in ince polietilen filmler üzerinde yaptıkları ünlü deneysel çalışması ile uyumludur. Şekil 80(c) ve (d)'de {110}(001) kayma sistemlerinin aktivitesi verilmiştir. {110}(001) kayma sistemlerinin çoğu dilimde aktif olduğu görülmektedir. Şekil 80(g) ve (h)'de polar dilimlerde aktif olan baskın kayma sisteminin {110}<1-10> olduğu görülmektedir. Şekil 80(a)-(d)'de polar dilimlerde zincir yönüne kayma olmadığı görülmektedir. Bu gözlemler Allan ve Bevis (1980)'in deneysel çalışmasındaki gözlemler ile uyumludur. Şekil 80(e) ve (f) karşılaştırıldığında (100)[010] ve (010)[100] kayma sistemlerindeki aktivite dağılımlarının aynı olduğu, sadece kayma miktarı değerlerinin farklı olduğu görülmektedir. Bu gözlem, belirtilen iki kayma sisteminin izdüşüm gerilimlerinin aynı olması gerektiğini belirten Lin ve Argon (1994) ile uyumludur. Kayma miktarları arasındaki fark, iki kayma sisteminin Tablo 4'te belirtilen kayma dirençlerinin farkından kaynaklanmaktadır.



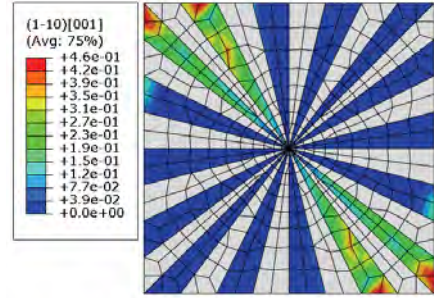
a) Zincir kayması (100)[001]



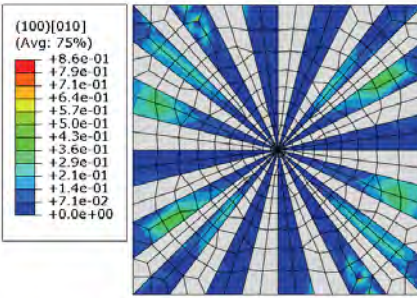
b) Zincir kayması (010)[001]



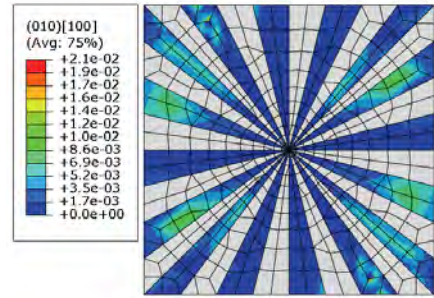
c) Zincir kayması (110)[001]



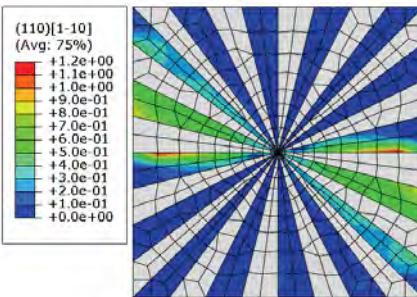
d) Zincir kayması (1 $\bar{1}$ 0)[001]



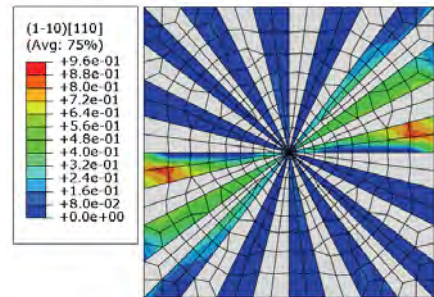
e) Enine kayma (100)[010]



f) Enine kayma (010)[100]



g) Enine kayma (110)[1 $\bar{1}$ 0]



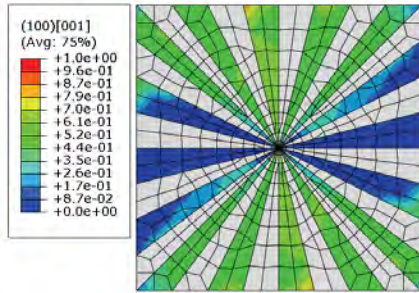
h) Enine kayma (1 $\bar{1}$ 0)[110]

Şekil 80. Basit çekme testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı

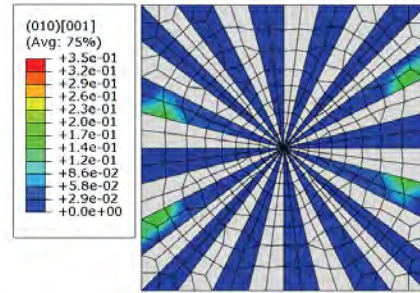
Şekil 81'de basit basma testi için sekiz farklı kayma sistemindeki plastik kayma dağılımları verilmiştir. Şekildeki ilk dört figür zincir yönündeki kayma sistemlerine daha sonraki dört figür ise zincir yönüne dik yöndeki kayma sistemlerine karşı gelmektedir.

Şekil 81(a)'da (100)[001] kayma sisteminin hemen tüm dilimlerde aktif olan baskın kayma sistemi olduğu görülmektedir. Şekil 81(c) ve (d)'de {110}[001] kayma sistemindeki aktivitenin düşük olduğu görülmektedir. Belirtilen gözlemler Bartczak vd. (1992)'nin HDPE numuneler üzerinde yaptığı tek eksenli basma deneyi gözlemleri ile uyumludur.

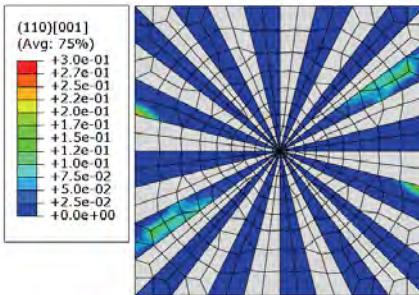
Şekil 82'de basit kesme testi için sekiz farklı kayma sistemindeki plastik kayma dağılımları verilmiştir. Şekildeki ilk dört figür zincir yönündeki kayma sistemlerine daha sonraki dört figür ise zincir yönüne dik yöndeki kayma sistemlerine karşı gelmektedir. En yüksek kayma miktarları Şekil 82'de verilen kayma sistemlerinden en yüksek kayma miktarının görüldüğü sistem Şekil 82(a)'deki (100)[001] sistemi olup, onu sırasıyla (100)[001], {110}<1-10>, (100)[010], (010)[001], {110}[001] sistemleri izlemektedir. Bartczak vd. (1994) HDPE numuneler üzerinde basit kesme yüklemesi deneyleri yaparak kayma sistemlerindeki aktiviteyi gözlemlenmiştir. Bu çalışmada en aktif kayma sisteminin (100)[001] olması ve kayma sistemlerinin aktivitelerine göre sıralamaları, {110}<1-10> sistemi hariç, Bartczak vd. (1994) çalışmasıyla uyumludur.



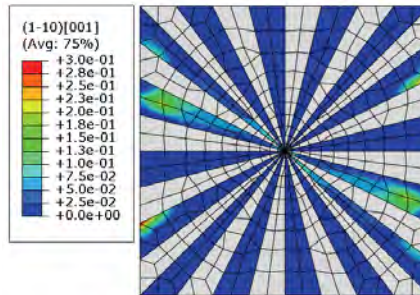
a) Zincir kayması (100)[001]



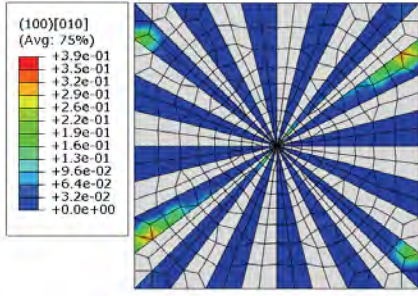
b) Zincir kayması (010)[001]



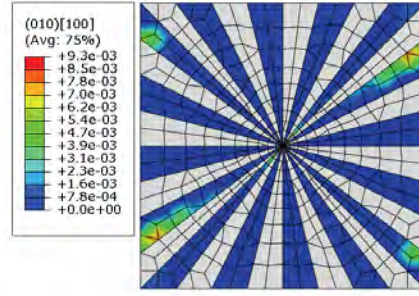
c) Zincir kayması (110)[001]



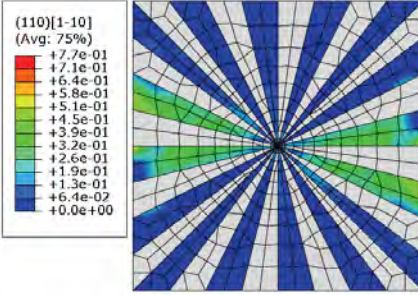
d) Zincir kayması (1 $\bar{1}$ 0)[001]



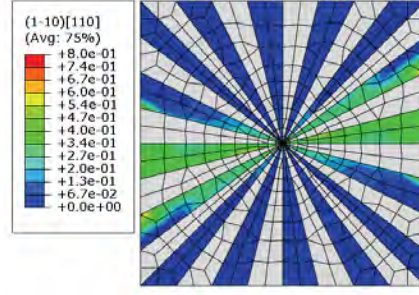
e) Enine kayma (100)[010]



f) Enine kayma (010)[100]

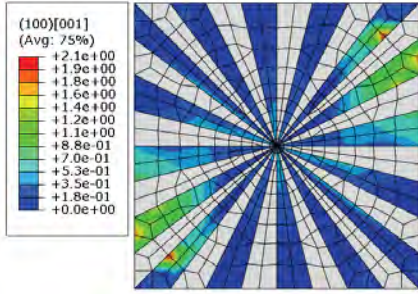


g) Enine kayma (110)[1 $\bar{1}$ 0]

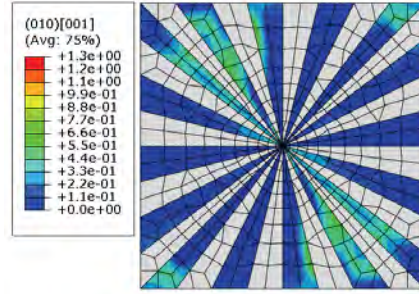


h) Enine kayma (1 $\bar{1}$ 0)[110]

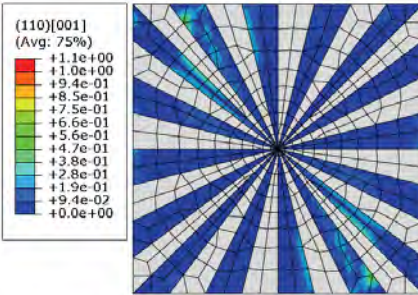
Şekil 81. Basit basma testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı



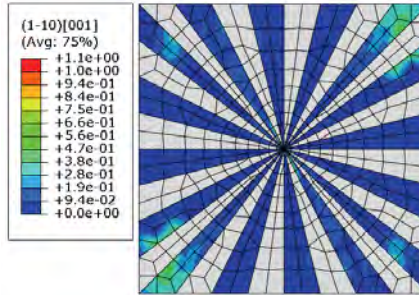
a) Zincir kayması (100)[001]



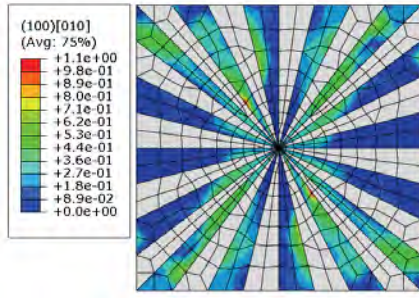
b) Zincir kayması (010)[001]



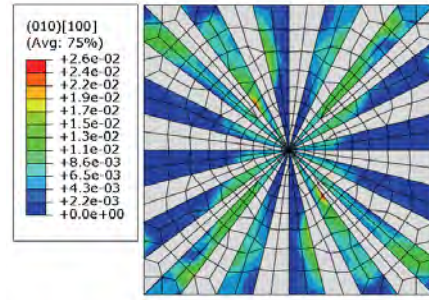
c) Zincir kayması (110)[001]



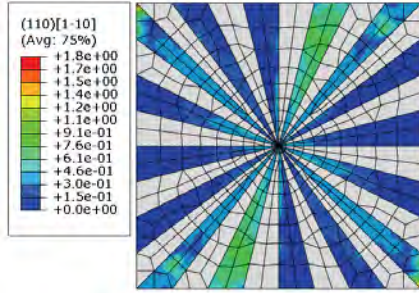
d) Zincir kayması (1 $\bar{1}$ 0)[001]



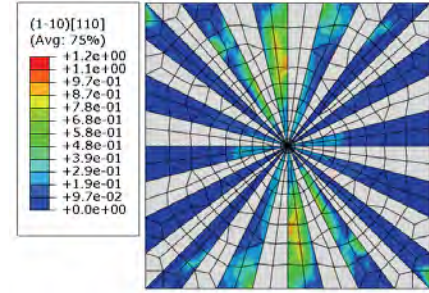
e) Enine kayma (100)[010]



f) Enine kayma (010)[100]



g) Enine kayma (110)[1 $\bar{1}$ 0]

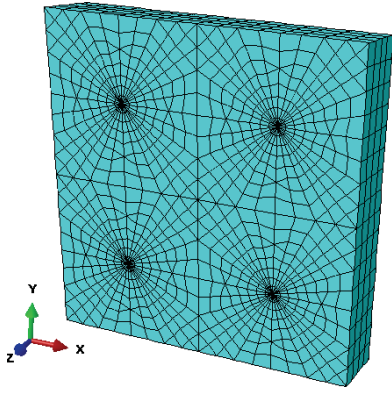


h) Enine kayma (1 $\bar{1}$ 0)[110]

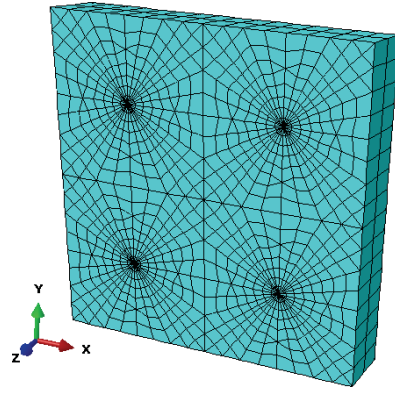
Şekil 82. Basit kesme testinde sekiz farklı kayma sistemlerindeki kayma miktarlarının dağılımı

3.3.2 Küresel Mikro-Yapının Boyutunun Etkisini İnceleyen Analizler Çözüm Ağları

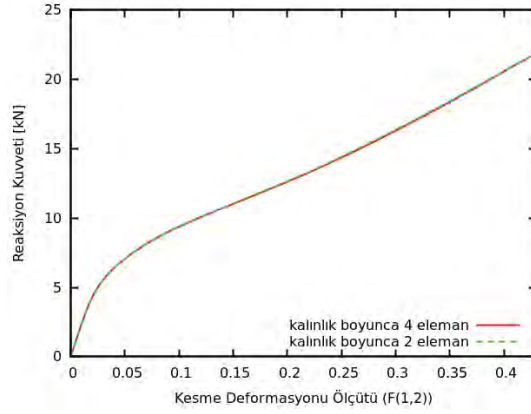
Küresel mikro-yapı boyutunun etkisi; bir önceki kısımda bir adet küresel mikro-yapının modellendiği hacmin, 4, 9 ve 16 adet küresel mikro-yapı barındıracak şekilde bölünmesi ile incelenmiştir. Sonlu elemanlar ağının sonuçlar üzerindeki etkisini en aza indirmek için hacim içerisindeki küresel mikro-yapılar önceki bölümde değerlendirilen 560 eleman kullanan ağın ölçeklenmesi ile oluşturulmuştur. Ancak bu ölçeklemenin kalınlık boyunca çok fazla elemana neden olduğu görülmüş, ve kalınlık boyunca olan eleman sayısının azaltılmasının etkisi incelenmiştir. Şekil 83'te ölçeklenmiş ağ ve Şekil 84'te ise ölçeklenmiş ağın kalınlık boyunca olan eleman sayısı 4 adetten 2 adete indirilerek elde edilmiş versiyonu görülmektedir. Bu sonlu elemanlar ağları kullanılarak çözülen analizlerin yük – deformasyon eğrilerini gösteren Şekil 85'te, kalınlık boyunca olan eleman sayısı azaltılan Şekil 84'daki ağın, yeterince hassas olduğu görülmektedir. Şekil 85'teki eğrilerin yakınlığı ve küresel mikro-yapı küçüldükçe çok hızlı artan hesaplama maliyeti göz önüne alınarak, 9 ile 16 adet küresel mikro-yapı barındıran analizlerde de Şekil 84'teki gibi kalınlık boyunca iki adet eleman kullanılmıştır.



Şekil 83. 2x2 adet küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 4480 adet sonlu elemandan barındıran ağ

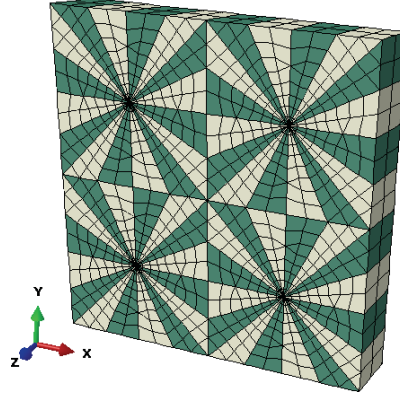


Şekil 84. 2x2 adet küresel mikro-yapının ağ hassasiyet çalışması için oluşturulan ve 2240 adet sonlu eleman barındıran ağ

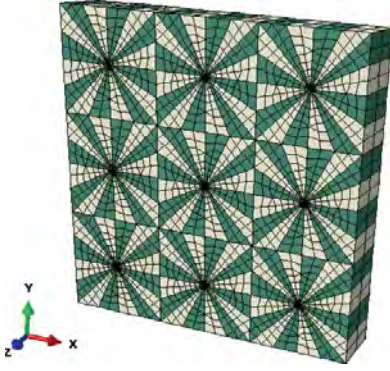


Şekil 85. Şekil 83'te ve Şekil 84'teki ağ yapıları ile çözülen 2x2 adet küresel mikro-yapının basit çekme yüklemesi sonlu elemanlar analizlerinin yük – deformasyon eğrileri

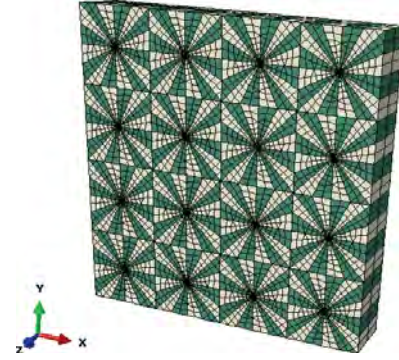
Eşit hacimde, 4, 9 ve 16 adet küresel mikro-yapı barındıran modellerin sonlu elemanlar ağları, amorf ve kristal bölgelerin sırasıyla koyu ve açık renk ile gösterildiği Şekil 86, Şekil 87 ve Şekil 88'de verilmiştir. Küresel mikro-yapı boyutunun etkisini inceleyen tüm analizler 16 dilimli ve kristal derecesi %50 olan küresel mikro-yapı için hazırlanmıştır.



Şekil 86. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.

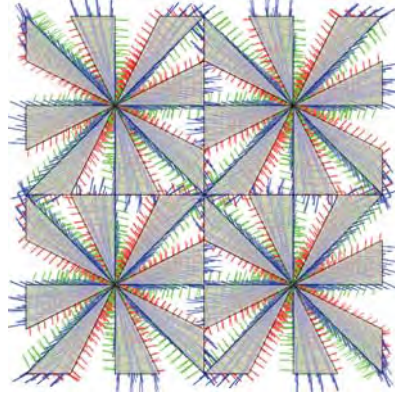


Şekil 87. Eş hacimde 3x3 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.



Şekil 88. Eş hacimde 4x4 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun tüm analizlerinde kullanılan sonlu elemanlar ağı. Amorf bölge dilimleri koyu, kristal bölge dilimleri açık renk ile gösterilmektedir.

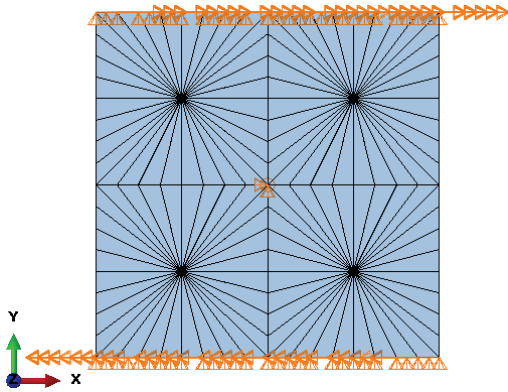
Kristal boyutunun etkisini inceleyen analizler içinde, eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı bulunduğu durumu inceleyen analizdeki kristal yönelimleri Şekil 89'da görüleceği üzere, her bir küresel mikro-yapı için kendi merkezi referans alınarak bir önceki kısımda açıklandığı gibi tanımlanmıştır. Eş hacimde 3x3 ve 4x4 adet küresel mikro-yapı bulunduğu durumu inceleyen analizlerin kristal yönelimleri de benzer şekilde tanımlanmıştır.



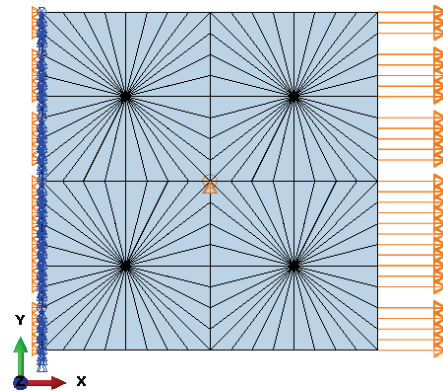
Şekil 89. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı bulunduran analizin kristal faz yönelimleri. Kırmızı doğrular polietilen kristalinin a yönünü, mavi doğrular b yönünü, yeşil doğrular ise zincir doğrultusu olan c yönünü göstermektedir.

Sınır Koşulları

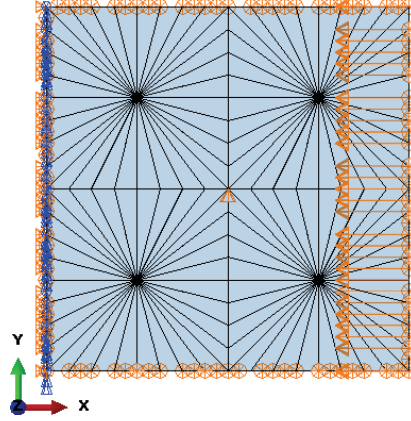
Şekil 90, Şekil 91 ve Şekil 92'de 2x2 adet küresel mikro-yapıyı modelleyen analizin, sırasıyla basit kesme, basit çekme ve basit basma analizlerinin sınır koşulları verilmiştir. Bu sınır koşulları ile tek bir küresel mikro-yapı için verilen sınır koşulları arasındaki tek fark tek bir küresel mikro-yapıda küresel mikro-yapı merkezine atanan sınır koşullarının bu bölümde kare kesitli şeklin geometrik orta noktasına atanmasıdır. 3x3 ve 4x4 adet küresel mikro-yapıyı modelleyen analizler için de benzer sınır koşulları kullanılmıştır.



Şekil 90. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit kesme analizlerinin sınır koşulları



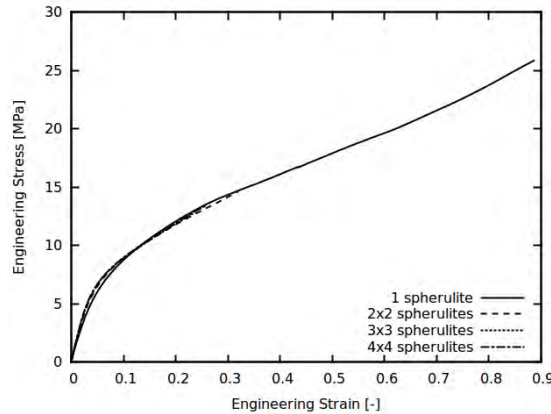
Şekil 91. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit çekme analizlerinin sınır koşulları



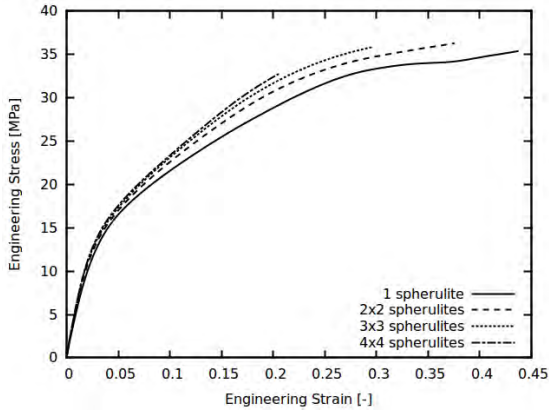
Şekil 92. Eş hacimde 2x2 adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun basit basma analizlerinin sınır koşulları

Analiz Sonuçları

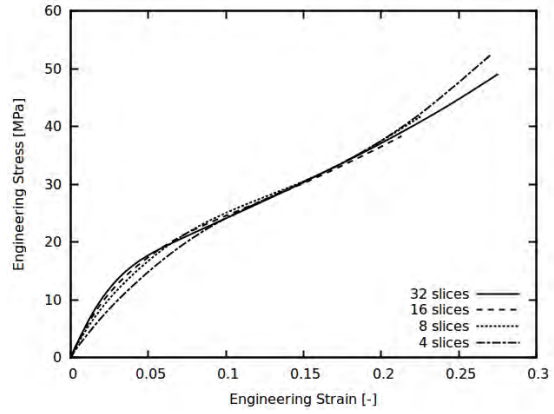
50 mm x 50 mm x 10 mm boyutlarında bir dikdörtgenler prizmasınının 1, 4, 9 ve 16 adet küresel mikro-yapı ile modellenmesi halinin basit kesme, basit çekme ve basit basma sınır koşulları ile çözülen sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri sırasıyla Şekil 93, Şekil 94 ve Şekil 95'te verilmiştir. Tüm yükleme koşulları için, küresel mikro-yapı boyutu küçüldükçe malzeme davranışının sertleştiği görülmektedir. Küresel mikro-yapı boyutu küçüldükçe gerilim – gerinim eğrileri arasındaki en büyük farklar çekme yükleme koşulu için oluşmaktadır. Her üç yükleme durumu için mikro-yapı boyutunun küçülmesine paralel olarak bir yük deformasyon eğrilerinde yakınsama gözlemlenmiştir. Küresel mikro-yapı küçüldükçe daha yüksek reaksiyon kuvvetleri elde edilmektedir. Bu durum Huan vd. (2013)'ün deneysel bulguları ile uyumludur.



Şekil 93. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit kesme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



Şekil 94. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit çekme sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri



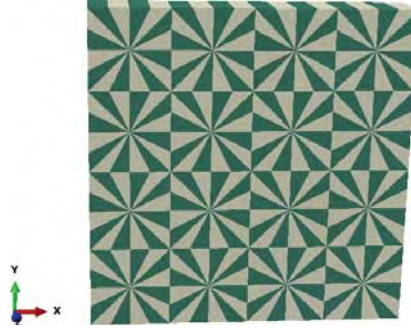
Şekil 95. Farklı boyutlara sahip küresel mikro-yapıların basit basma sınır koşulları altındaki sonlu elemanlar analizlerinin gerilim – gerinim eğrileri

Küresel mikro-yapı boyutunun etkisini inceleyen analizler arasından seçilen 4x4 adet küresel mikro-yapıyı modelleyen analiz; şekil değiştirmemiş model görünümü ile kesme, çekme ve basma sınır koşulları için olan şekil değiştirmiş ağ görünümleri ve von Mises gerilimlerinin dağılımları Şekil 96 - Şekil 102'de verilmiştir.

Her üç yükleme koşulu için tek bir küresel mikro-yapının yüklemelerinde görülen gerilim dağılımlarına yakın, yineleyen desenler gözlenmiştir. Dikkat çekici farklılıklar ise sınır bölgelerine yakın olan küresel mikro-yapılarda gözlenmiştir.

Şekil 61'de kesme yüklemesi için görece düşük gerilimlerin gözleendiği amorf faz dilimleri ile yükleme koşulları bakımından yakın konumda bulunan Şekil 98'deki küresel mikro-yapılarda, benzer şekilde daha düşük gerilmeler elde edilmiştir. Şekil 98'in ortalarına yakın olan küresel mikro-yapıların aynı amorf faz dilimlerinde böylesi düşük gerilmeler görülmediğinden; bu durumun malzeme modellerinden değil, yükleme sınır koşullarından kaynaklandığı anlaşılır.

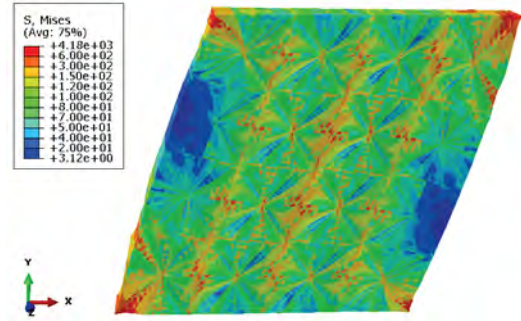
Çekme yüklemesi için von Mises gerilimlerinin dağılımını gösteren Şekil 100'de ilk göze çarpan noktalardan biri 3 ve 7 numaralı dilimlerde modelin sınırında yer alan küresel mikro-yapılar için, Şekil 63'te tek bir küresel yapı için verildiği gibi çok düşük gerilmeler elde edildiği halde; Şekil 100'deki diğer küresel mikro-yapıların 3 ve 7 numaralı dilimlerinde daha yüksek derecede gerilmeler elde edilmesidir. Bu, modelin sınırlarındaki küresel mikro-yapıların sınır koşullarının tek bir küresel mikro-yapıyı modelleyen analize yakın olmasından kaynaklanmaktadır. Şekil 102'de gösterilen basma yüklemesi için de; 3 ve 7 numaralı kristal dilimlerinde sınırdaki küresel mikro-yapılarda daha düşük, diğer küresel mikro-yapılarda ise daha yüksek gerilim görülmesi, aynı sebeptir.



Şekil 96. Eş hacimde 4x4adet küresel mikro-yapı barındıran konfigürasyonun şekil değiştirmemiş model görünümü. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



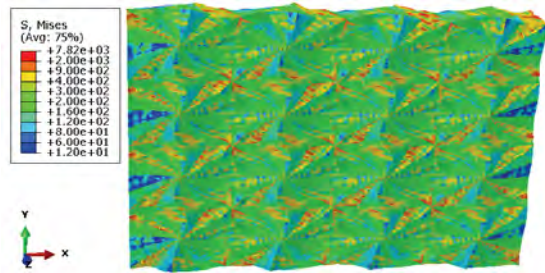
Şekil 97. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 98. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının kesme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.



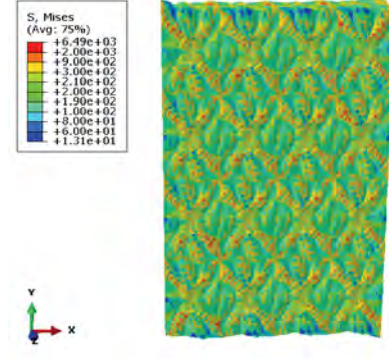
Şekil 99. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 100. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının çekme yüklemesi analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.

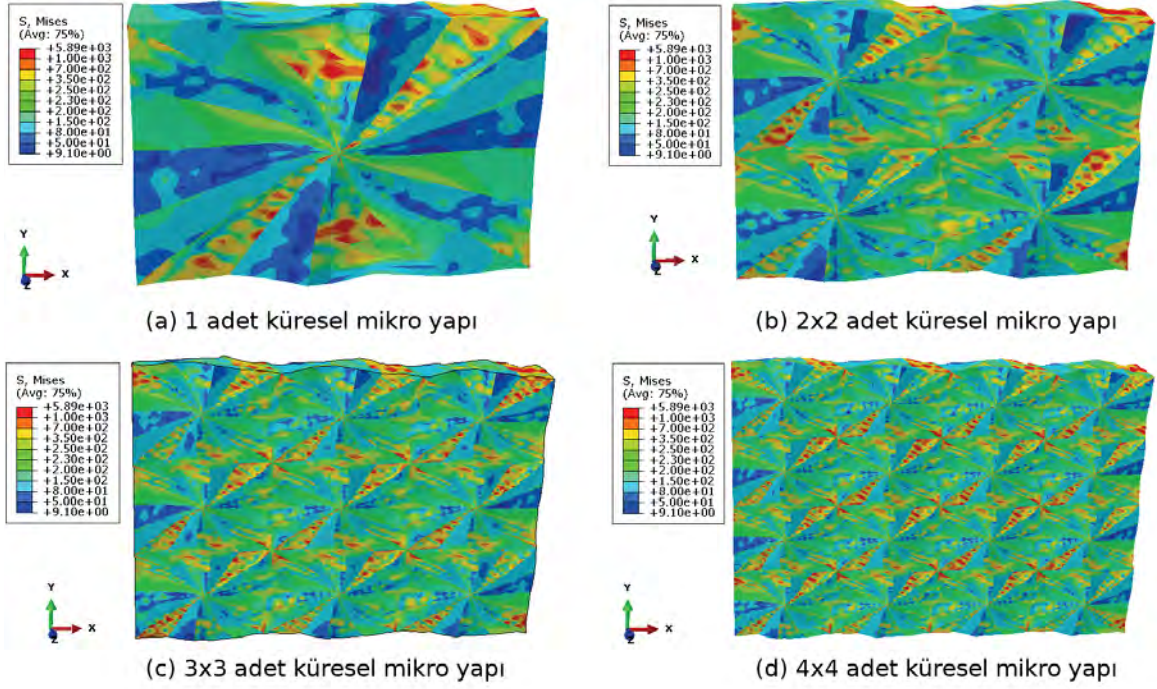


Şekil 101. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının basma yüklemesi analizi için şekil değiştirmiş sonlu elemanlar modeli. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır. Koyu renkli dilimler amorf, açık renkli dilimler kristal fazı temsil etmektedir.



Şekil 102. Eş hacimde 4x4 adet bulunan küresel mikro-yapının basma analizi sonunda elde edilen şekil değiştirmiş sonlu elemanlar ağı üzerindeki von Mises gerilimleri dağılımı. Deformasyon ölçekleme katsayısı kullanılmamıştır.

Son olarak Şekil 103'te çekme yüklemesi altında makroskopik deformasyonun $\bar{F}_{11} = 1.3$ olduğu durumda dört farklı küresel mikro-yapı boyu için elde edilen von Mises gerilimleri verilmiştir. Her dört mikro-yapı boyu için von Mises gerilimleri aynı kontur aralıkları için çizilmiştir. Şekilde, mavi renk düşük gerilimli, kırmızı renk ise yüksek gerilimli bölgeleri göstermektedir. Mikro-yapı boyutu küçüldükçe (Şekil 103 (a)'dan Şekil 103 (d)'ye doğru) mavi renkli bölgelerin yoğunluğunun azaldığı görülmektedir. Bu durum Şekil 94'te verilen yük-deformasyon eğrilerinin mikro yapı boyutu küçüldükçe artması ile uyumludur. Benzer uyumluluk basma ve kesme analizleri için de gözlenmiştir.



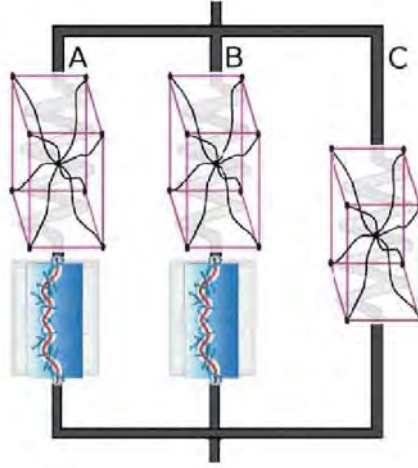
Şekil 103. Çekme yüklemesi analizleri için şekil değiştirmiş model ve von Mises gerilimlerinin dağılımı

3.4. İmplant Tasarımına Yönelik Sayısal Benzetimlerin Yapılması

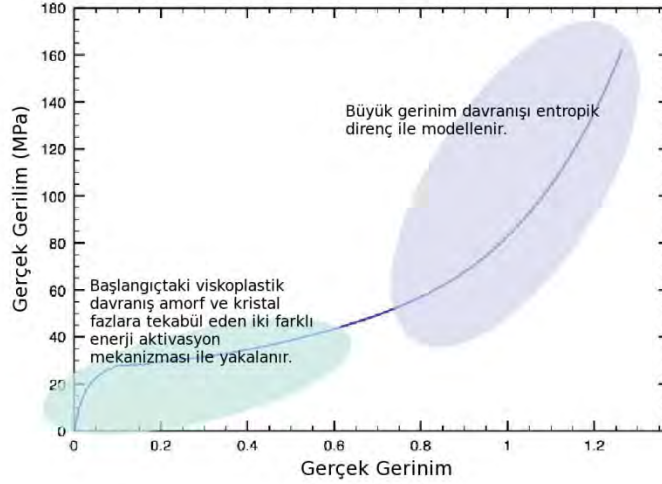
Bu kısımda daha uzun ömürlü implantların tasarımına yönelik yapılan sonlu eleman analiz modeli ve analizlerde UYMAPE için kullanılan malzeme modeli (Bergström ve Bischoff, 2010) açıklanacaktır.

3.4.1. Bergstrom ve Bischoff (2010) Üç Ağ Modeli

Yüzey dokusu kullanılarak daha uzun ömürlü implant tasarımına yönelik sonlu eleman analizlerinde kullanılmak üzere UYMAPE için Bergström ve Bischoff (2010) tarafından önerilen üç ağ modeli seçilmiştir. Bu modelin seçilmesinin ana sebepleri hesaplama süresinin kısa olması ve deney sonuçlarını yakalama performansının üstünlüğüdür. Modelin reolojik gösterimi Şekil 104'teki gibi olup, modelde paralel olarak çalışan üç adet yapı kurgulanmaktadır. UYMAPE'lerin deformasyonunda amorf ve kristal fazların birlikte ve uyumlu şekilde deforme olması ve aktivasyon mekanizmalarından kaynaklanan viskoplastik etkiler A ve B ağlarınca göz önüne alınırken, kauçuklardaki temel elastik mekanizma olan entropik direncin davranışı C ağı ile modellenmektedir. Viskoplastik etkiler ile entropik direnç etkisinin baskın olduğu bölgelerin UYMAPE basit çekme gerinim - gerilim eğrisi için görünümü Şekil 105'te verilmiştir.



Şekil 104. Üç ağ modelinin reolojik gösterimi (Berstrom ve Bishoff, 2010)



Şekil 105. UYMAPE için tipik bir basit çekme deneyi gerçek gerilim-gerçek gerilim eğrisinde viskoplastik etkinin ve entropik direnç etkisinin baskın olduğu kısımların gösterimi (Berstrom ve Bishoff, 2010)

Bilindiği üzere, yapıların reolojik gösterimde paralel bağlanması, büyük gerilim teorisinde yapıların Taylor tipi homojenizasyon yaklaşımına karşılık gelir. Bu sebeple, A, B ve C ağlarının deformasyon gradyan tensörleri,

$$\mathbf{F}_A = \mathbf{F}_B = \mathbf{F}_C = \mathbf{F} \quad (82)$$

eşitliği ile birbirlerine ve makroskopik deformasyon gradyan tensörüne eşit alınır. Makroskopik Cauchy gerilim tensörü ise

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_A + \boldsymbol{\sigma}_B + \boldsymbol{\sigma}_C \quad (83)$$

eşitliği ile tanımlanarak; A, B ve C ağlarının Cauchy gerilim tensörlerinin toplamına eşit olur. A ağı için viskoplastik bir malzeme modeli kullanılır. Bunun için A ağının deformasyon gradyanı elastik ve viskoplastik bileşenlerine çarpımsal olarak

$$\mathbf{F}_A = \mathbf{F}_A^e \mathbf{F}_A^v \quad (84)$$

ifadesiyle ayrılır. A ağının Cauchy gerilim tesörü, kinematik olarak sadece elastik deformasyon gradyanına bağlıdır ve

$$\boldsymbol{\sigma}_A = \frac{\mu_A}{\lambda_A^{e*}} \left[1 + \frac{\theta - \theta_0}{\hat{\theta}} \right] \frac{\mathcal{L}^{-1}(\bar{\lambda}_A^{e*}/\lambda_L)}{\mathcal{L}^{-1}(1/\lambda_L)} \text{dev}(\mathbf{b}_A^{e*}) + \kappa (J_A^e - 1) \mathbf{I} \quad (85)$$

ifadesiyle hesaplanır. Denklem (85)'te $J_A^e = \det(\mathbf{F}_A^e)$, $\mathbf{b}_A^{e*} = (\mathbf{J}_A^e)^{-2/3} \mathbf{F}_A^e (\mathbf{F}_A^e)^T$ hacim korunumlu deformasyon gradyanının sol Cauchy-Green deformasyon tensörü, $\bar{\lambda}_A^{e*} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{b}_A^{e*})/3}$ 8-zincir topolojisi yaklaşımına göre efektif zincir gerinimi, $\mathcal{L}^{-1}(x)$ Langevin fonksiyonunun tersi, $\text{dev}[\cdot]$ deviatorik projeksiyon eşlemesi, \mathbf{I} ikinci derece birim tensördür. θ , θ_0 , $\hat{\theta}$ sırasıyla, ortam sıcaklığı, referans ortam sıcaklığı ve gerilimin (stiffness) sıcaklıkla değişim parametresidir. Çalışmada referans sıcaklığı ortam sıcaklığına eşit olarak alınmasıyla, sıcaklığın gerilim üzerindeki etkisi göz önüne alınmamıştır. Denklem (85)'teki μ_A , λ_L ve κ malzeme parametreleri olup açıklamaları ve değerleri Tablo 8'de verilmiştir.

Tablo 8. Üç ağ modelinin malzeme parametreleri ve %61 kristallik derecesine sahip UYMAPE'in oda sıcaklığındaki davranışını modellemek için seçilen değerleri

Sembol	Değer	Açıklama
μ_A	200 MPa	A ağının kesme modülü
λ_L	3.25	Kilitlenme gerilmesi
κ	6000 MPa	Bulk modülü
$\hat{\tau}_A$	3.25 MPa	A ağının akma direnci
a	0.073	Akmanın basınç ile ilişki katsayısı
$m_a = m_b$	20	A ağının gerilim üs faktörü
μ_{Bi}	293 MPa	B ağının kesme modülünün başlangıç değeri
μ_{Bf}	79.1 MPa	B ağının kesme modülünün nihai değeri
β	31.9	μ_B 'nin değişim hızı
$\hat{\tau}_B$	20.1 MPa	B ağının akma direnci
μ_C	10.0 MPa	C ağının kesme modülü
q	0.23	İkinci invariant I_2 'nin C ağına katkısının oranı

Viskoplastik deformasyon gradyan tensörünün değişim hızı $\dot{\mathbf{F}}_A^v$, viskoplastik kayma miktarına

$$\dot{\gamma}_A = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau_A}{\hat{\tau}_A + aR(p_A)} \right)^{m_A} \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^n \quad (86)$$

bağlı olarak aşağıdaki şekilde

$$\dot{\mathbf{F}}_A^v = \dot{\gamma}_A \mathbf{F}_A^{e-1} \frac{\text{dev}(\boldsymbol{\sigma}_A)}{\tau_A} \mathbf{F} \quad (87)$$

hesaplanır. Denklem (86)'da $\tau_A = \|\boldsymbol{\sigma}\|$ Cauchy gerilim tensörünün normu, $p_A = -tr(\boldsymbol{\sigma})/3$ basınç, $R(x) = (x + |x|)/2$ rampa fonksiyonudur. Denklem (86)'da $\dot{\gamma}_0$, a , \hat{t}_A , m malzeme parametreleri olup, açıklamaları ve kullanılan değerleri Tablo 8'de verilmiştir.

Viskoplastik deformasyon gradyanı, Denklem (87)'de verilen değişim hızına göre algoritmik olarak kapalı Euler integrasyon yöntemi ile

$$\mathbf{F}_{A,n+1}^v = \mathbf{F}_{A,n}^v + (t_{n+1} - t_n) \dot{\mathbf{F}}_{A,n+1}^v \quad (88)$$

hesaplanabilir. Denklem (84), (85) ve (88)'in birbirleriyle tutarlı olmasını sağlayan viskoplastik deformasyon gradyan tensörü \mathbf{F}_A^v malzeme rutini içerisinde yapılan lokal iterasyonlar ile bulunur.

B ağının davranışı A ağı ile aynı malzeme modeli ile tanımlanır. Ancak kullanılan malzeme parametrelerinin değerleri farklıdır. Ayrıca, B ağının elastik kesme modülü μ_B , A ağındaki viskoplastik kayma miktarına bağlı olarak aşağıdaki şekilde

$$\dot{\mu}_B = -\beta(\mu_B - \mu_{Bf}) \dot{\gamma}_A \quad (89)$$

azalır.

C ağı tamamen elastik davranış göstermekte olup, gerilimi kinematik açıdan makroskopik deformasyon gradyanına bağlı olarak 8-zincir modelinin birinci dereceden I_2 bağıllığı ile

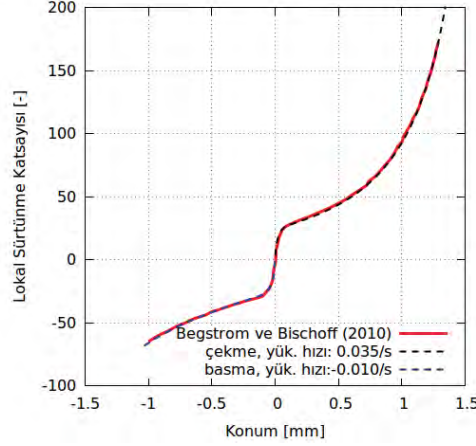
$$\boldsymbol{\sigma}_C = \frac{1}{1+q} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_c}{J\lambda_{chain}} \left[1 + \frac{\theta - \theta_0}{\hat{\theta}} \right] \frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_{chain}/\lambda_L)}{\mathcal{L}^{-1}(1/\lambda_L)} \text{dev}(\mathbf{b}^*) \\ + \kappa (J-1)\mathbf{I} + \mathbf{q} \frac{\mu_c}{J} \left[I_1^* \mathbf{b}^* - \frac{2I_2^*}{3} \mathbf{I} - (\mathbf{b}^*)^2 \right] \end{array} \right\} \quad (90)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem (90)'da $J = \det(\mathbf{F})$ makroskopik deformasyon gradyanının determinantı iken, hacim korunumlu makroskopik deformasyon gradyanına $\mathbf{F}^* = J^{-1/3} \mathbf{F}$ bağlı $\mathbf{b}^* = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^{*T}$ Cauchy-Green deformasyon tensörü, $I_1^* = tr(\mathbf{b}^*)$, $I_2^* = \frac{1}{2} [(I_1^*)^2 - tr(\mathbf{b}^* \mathbf{b}^*)]$ ise birinci ve ikinci invariantsdır. Denklem (90)'da λ_{chain} ise

$$\lambda_{chain} = \sqrt{tr(\mathbf{b}^*)/3} \quad (91)$$

şeklinde hesaplanır.

Bergstrom ve Bischoff (2010) malzeme modeli bağımsız bir altprogram olacak şekilde FORTRAN programlama dilinde kodlanmıştır. Kodlanan model aracılığı ile makalede verilen gerinim-gerilim eğrileri elde edilmiştir. Bergstrom ve Bischoff (2010)'da verilen gerinim-gerilim eğrileri ile kodlanan model aracılığı ile elde edilen eğrilerin karşılaştırması Şekil 106'da verilmiştir.



Şekil 106. Nominal gerinim cinsinden tanımlı farklı yükleme hızları için makaledeki basit çekme ve basma gerinim-gerilim eğrileri ile malzeme noktasındaki analiz sonuçlarının karşılaştırması

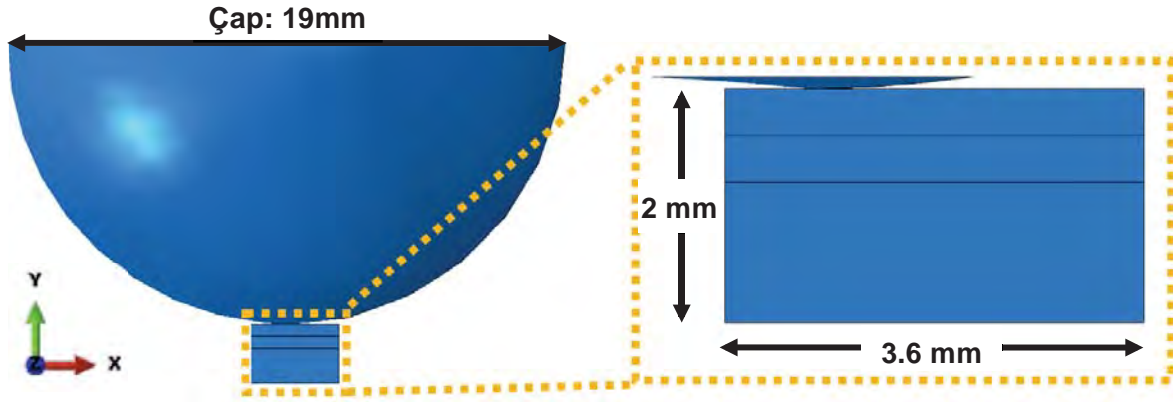
Kodlamanın doğrulanmasından sonra Bergstrom ve Bischoff (2010) malzeme modeli ABAQUS sonlu elemanlar yazılımı ile UMAT altprogramı aracılığıyla bütünleştirilmiştir.

3.4.2. Yüzey Dokusunun Sürtünme Katsayısı Üzerindeki Etkisini İnceleyen Analizler

Şekil 1b'de görüldüğü üzere, diz eklemine UYMAPE ile temas eden metal parça düz değildir ve belirli bir kavise sahiptir. Bu sebeple, yüzey dokusunun etkisi kavisli bir cismin UYMAPE ile olan sürtünme problemi için incelenmiştir. UYMAPE parçaya kıyasla büyük bir çapa sahip olan, 19 mm çaplı rijit bir küre, 2 mm derinliğe sahip 3.6mm x 3.6mm plan boyutlarındaki bir UYMAPE blok üzerine Şekil 107'de gösterildiği gibi yerleştirilmiştir. Küre rijit olarak modellenirken, UYMAPE parçanın bünye denklemi olarak Bergstrom ve Bischoff (2010)'un üç ağ malzeme modeli kullanılmıştır.

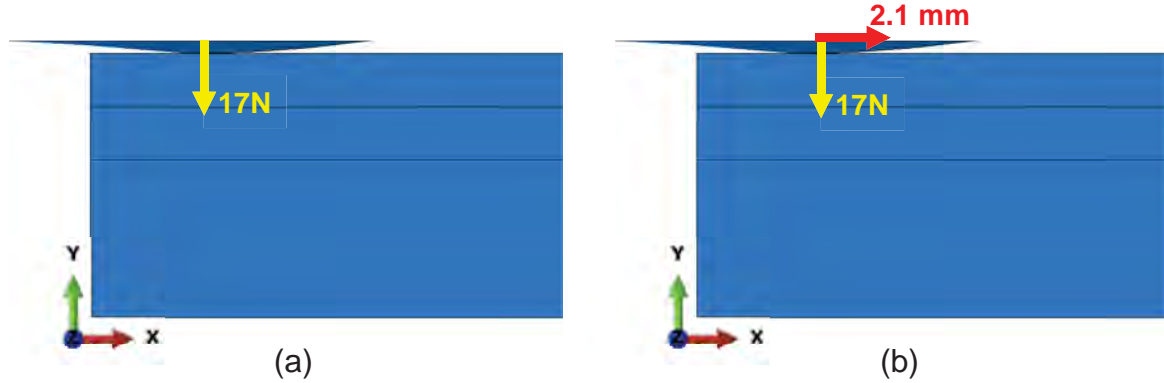
Küre ve UYMAPE arasındaki etkileşim temas problemi tanımlanarak sağlanmıştır. Temas probleminin basınç-açıklık ilişkisi olarak sert basınç-açıklık yöntemi kullanılmış; böylece küredeki yüklerden kaynaklanan basınç, UYMAPE parçaya direkt olarak aktarılmıştır. Temas yüzeylerinin sürtünme davranışı, sabit sürtünme katsayısı kullanan Coulomb sürtünme modeli ile modellenmiştir. Sürtünme katsayısı literatürdeki UYMAPE'in kontak davranışını

modelleyen bir çok çalışmada (Cho vd., 2010; Regis vd., 2014) olduğu gibi 0.1 olarak alınmıştır.



Şekil 107. Rijit küre ve UYMAPE parçanın yerleşimi ve boyutları

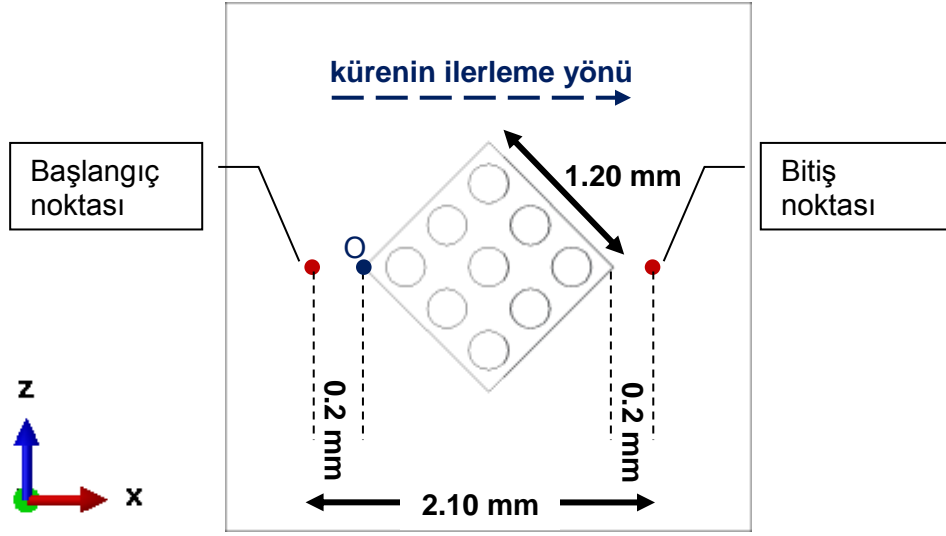
Analizler iki adımda yapılmıştır. İlk adımda UYMAPE üzerine yerleştirilen kürenin ağırlık merkezine Şekil 108(a)'da görüldüğü üzere 17N'luk düşey yük etki ettirilmiş, bu adım 1 saniye içerisinde tamamlanmıştır. İkinci adımda ise küre, 17N'luk sabit düşey yük altında Şekil 108(b)'de görüldüğü üzere x yönünde 50 mm/s hız ile 2.1 mm ilerletilmiştir. Kürenin çapı ve 17N'luk düşey yük miktarı Cervantes vd. (2013)'ün deneysel çalışmasından alınmıştır.



Şekil 108. Analizin yükleme adımları: (a) küre üzerine 17N'luk düşey yükün uygulanması, (b) düşey kuvvet sabit tutulurken, kürenin x yönünde 2.1mm ilerletilmesi

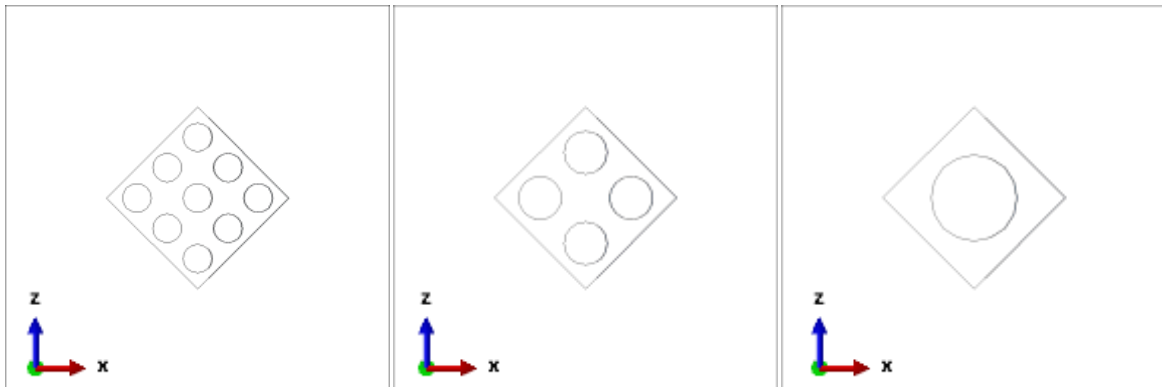
Yüzey dokusunun sürtünme kuvveti üzerindeki etkisini incelemek amacıyla Şekil 109'daki plan görünümünde görüldüğü gibi UYMAPE parça üzerinde 1.2 mm kenar boyutuna sahip kare biçimli bir kontrol alanı oluşturulmuştur. Yapılan çalışmalarda bu kontrol alanı içerisine farklı yüzey dokuları uygulanmış ve bunların etkileri incelenmiştir. Şekil 109'da kürenin

UYMAPE yüzey ile temas ettiği ilk nokta ve 2.1 mm ilerlemenin ardından ulaşılan nokta sırasıyla, başlangıç noktası ve bitiş noktası olarak işaretlenmiştir.



Şekil 109. UYMAPE yüzey üzerindeki 1.2mm kenar uzunluğuna sahip kare biçimli kontrol alanı, rijit kürenin ilk temas noktası (başlangıç noktası) ve bu noktanın x yönünde 2.1 mm ilerletilmiş konumu (bitiş noktası)

Yüzey dokuları, UYMAPE parça üzerine 0.4 mm derinliğinde ve belirli çaplara sahip silindirik biçimli çukurlar açılarak elde edilmiştir. Çukurlar kontrol alanı içerisine 3x3, 2x2 ve 1x1 olmak üzere üç farklı desende yerleştirilmiştir. Desenlerin plan görünümü Şekil 110'daki gibi olup kontrol alanı içerisinde 3x3'lük desende 9, 2x2'lik desende 4, 1x1'lik desende 1 adet çukur bulunmaktadır. Tüm desenler için kontrol alanı içerisindeki çukurların yüzey alanları toplamı eşit olup, çukur yüzey alanları toplamının kontrol alanına oranı %34.9'dur. Tüm desenlerdeki silindirler birbirlerine eşit mesafededir. Desenlerdeki çukur çapları ve çukurlar arasındaki en kısa mesafe Tablo 9'da verilmiştir.

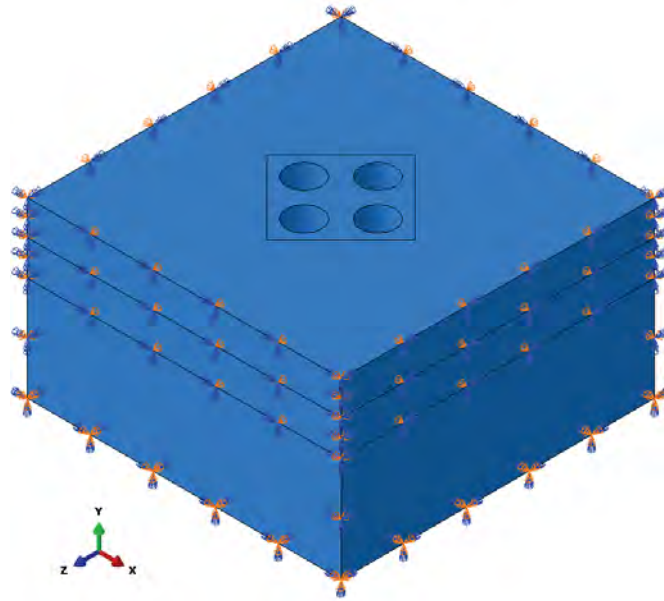


Şekil 110. Sırasıyla 3x3, 2x2 ve 1x1'lik çukur deseni kontrol alanları için UYMAPE parçanın yüzeyinin plan görünümü

Tablo 9. Farklı desenler için çukur çapları ve çukurlar arasındaki mesafeler

Desen	Çukur çapı (mm)	Çukurlar arası mesafe (mm)
3x3	0.266	0.133
2x2	0.4	0.2
1x1	0.8	0.4

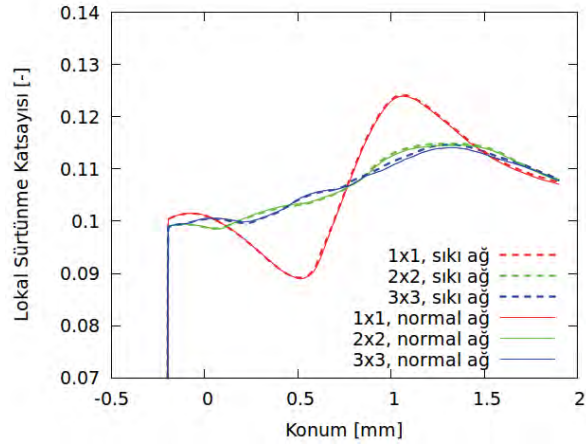
Analizlerde UYMAPE parçaya atanan sınır koşulları 2x2'lik desenli kontrol yüzeyi için Şekil 111'de verilmiştir. Taban yüzeyindeki düğüm noktaları tamamen sabit iken, yan yüzeylerdeki düğüm noktalarının hareketi sadece yüzeye normal olan doğrultuda kısıtlanmıştır.



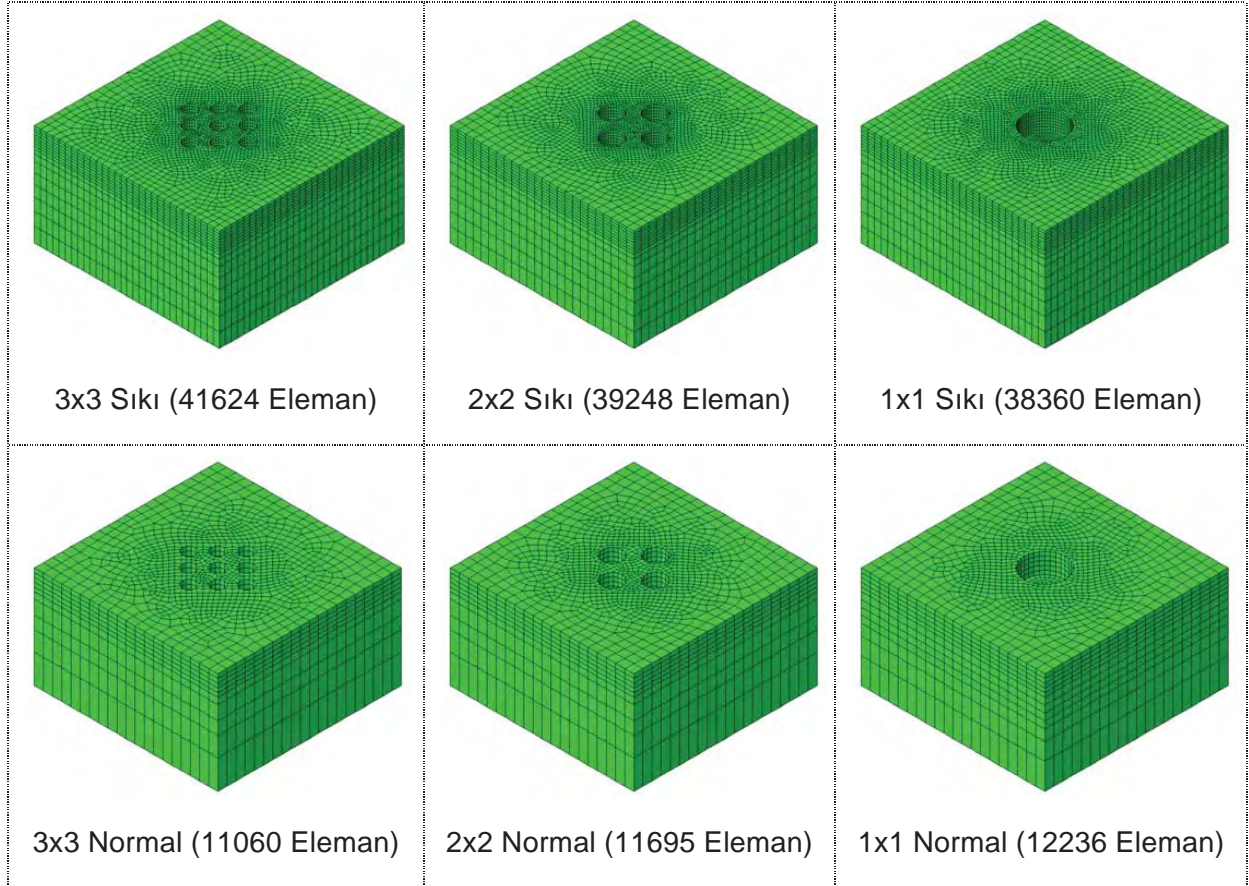
Şekil 111. UYMAPE parçanın sınır koşulları. Taban yüzeyindeki düğüm noktaları tamamen sabit iken, yan yüzeylerdeki düğüm noktalarının hareketi sadece yüzeye normal olan doğrultuda kısıtlanmıştır

Ağ Hassasiyeti Çalışmaları

Üç adet çukur deseni için ağ hassasiyeti çalışmasının sonuçları Şekil 112'deki gibidir. Şekil 112'de belirtilen lokal sürtünme katsayısı, kürenin sabit düşey yük altında x-yönünde ilerlemesine karşı UYMAPE parçanın küreye uyguladığı x-yönündeki kuvvetin, 17 N'luk düşey kuvvete bölünmesi ile elde edilmektedir. Ağ hassasiyeti çalışması 0.4mm derinliğe sahip boş çukurlar için yapılmıştır. Kullanılan sonlu elemanlar ağlarının görünüşleri Şekil 113'teki gibidir. Sıkı ağ ve normal ağ kullanan analizler arasındaki sonuç farkları uygun bulunduğundan, çukurların boş olduğu durum için Şekil 113'te normal ağ etiketi ile gösterilen sonlu elemanlar ağları kullanılmıştır. Konum eksenini Şekil 109'da O noktası ile işaretlenen kontrol alanının başlangıç noktasını orijin olarak almaktadır.



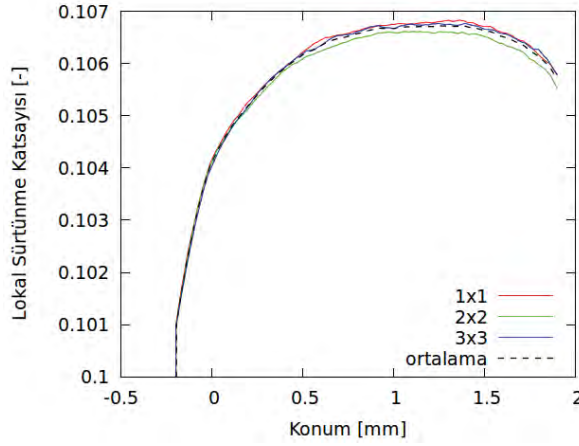
Şekil 112. Ağ sıklığının sürüklenme güzergahı boyunca analizden elde edilen sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi



Şekil 113. Farklı çukur desenleri için yapılan ağ hassasiyeti çalışmasında kullanılan sıkı ve normal sonlu elemanlar ağları

Çukursuz yüzey için olan ya da çukurların bir dolgu maddesi ile doldurulması durumunu araştıran analizler için; Şekil 113'te normal etiketi ile verilen sonlu elemanlar ağları var olan elemanlar değiştirilmeden çukurları dolduracak yeni elemanlar eklenerek oluşturulmuştur.

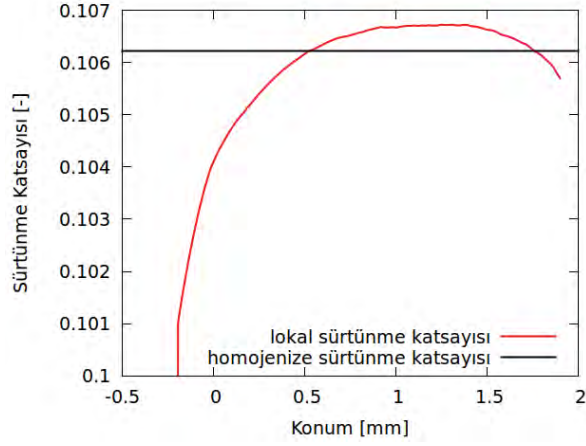
Çukursuz yüzey için lokal sürtünme katsayısı değişim problemi 1x1, 2x2 ve 3x3 çukur desenli ağların çukurları doldurularak elde edilen sonlu elemanlar ağları ile ayrı ayrı çözülmüştür. Bu analizlerden elde edilen eğriler ve bu üç eğrinin ortalaması Şekil 113'te verilmiştir. Şekil 113'te "ortalama" etiketi ile belirtilen eğri, çukursuz yüzeyin lokal sürtünme katsayısını en iyi temsil eden eğri olarak seçilmiştir.



Şekil 114. Farklı sonlu elemanlar ağları ile bulunan çukursuz yüzey için sürtünme katsayısının değişimi sürüklenme güzergahı boyunca değişimi

Homojenize Sürtünme Katsayısı

Kürenin Şekil 109'da gösterilen kontrol alanı üzerinden geçtiği kısım için homojenize bir sürtünme katsayısı tanımlanmıştır. Kürenin merkezi, [0, 1.7] mm aralığındaki konum değerleri için kontrol alanı üzerindedir. Homojenize sürtünme katsayısı; lokal sürtünme katsayısının konum ile değişim grafiğinin [0, 1.7] mm değer aralığındaki alanının, 1.7 mm sürüklenme mesafesine bölümüdür. Homojenize sürtünme katsayısı, çukursuz yüzey için Şekil 115'teki gösterildiği gibi 0.1062 olarak bulunmuştur.



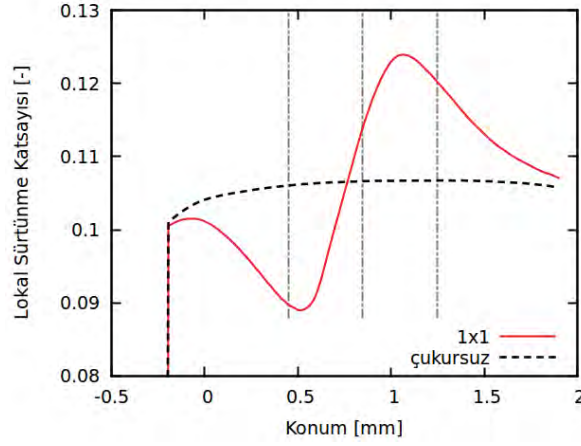
Şekil 115. Çukursuz yüzey için lokal sürtünme katsayısı ve homojenize sürtünme katsayısının kürenin merkezinin konumu ile değişimi ve homojenize sürtünme katsayısının değeri

4. BULGULAR

Bölüm 3.4.2'de detayları bulunan çalışmanın, sonuçları bu bölümde verilmiştir. Alt bölümlerde değerleri belirtilmeyen parametrelerin değerleri Bölüm 3.4.2'de verildiği gibidir.

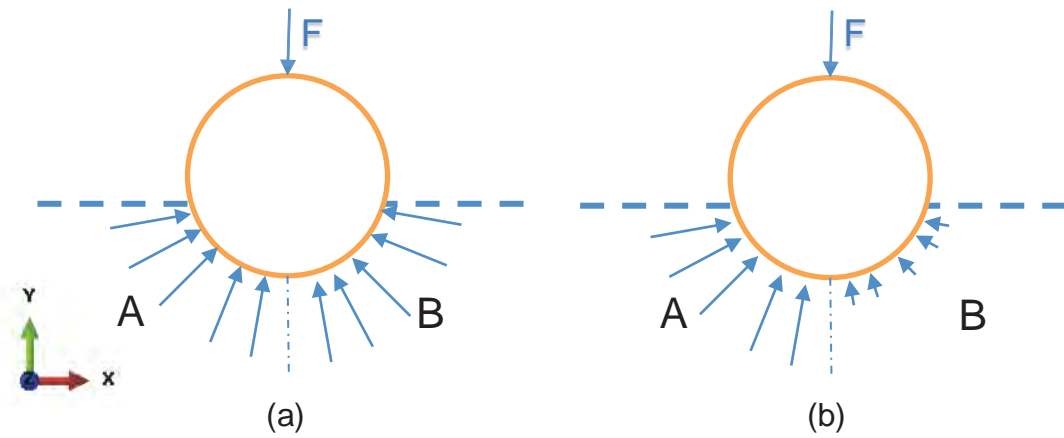
4.1. Çukurları Boş Olan Yüzeyler

0.4 mm derinliğe sahip 1x1'lik desendeki boş çukurlu yüzeyin lokal sürtünme katsayısının değişimi Şekil 116'da çukursuz yüzey için olan eğri ile birlikte verilmiştir. 1x1'lik desen için, kürenin ilerleme güzergahında çukurun başlangıç, orta ve bitiş noktalarının konumları 0.45, 0.85, 1.25 mm'dir. Bu noktalar Şekil 116'daki lokal sürtünme katsayıları grafiğinde kesikli dikey çizgiler ile işaretlenmiştir. Şekil 116'da sürtünme katsayısının; kürenin merkezi; hemen hemen çukur başlangıç noktasına ulaşıncaya kadar düştüğü, hemen ardından yaklaşık çukurun son noktasına ulaşıncaya kadar arttığı, ve en nihayetinde küreden uzaklaştıkça çukursuz yüzeyin sürtünme katsayısına yakınsadığı görülmektedir. Çukurun başlangıç noktasından sonra görülen sürtünme katsayısındaki artma çukura ulaşmadan önceki azalmadan çok daha yüksektir.



Şekil 116. 1x1'lik desende 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzey için lokal sürtünme katsayısının küre merkezinin konumu ile değişimi

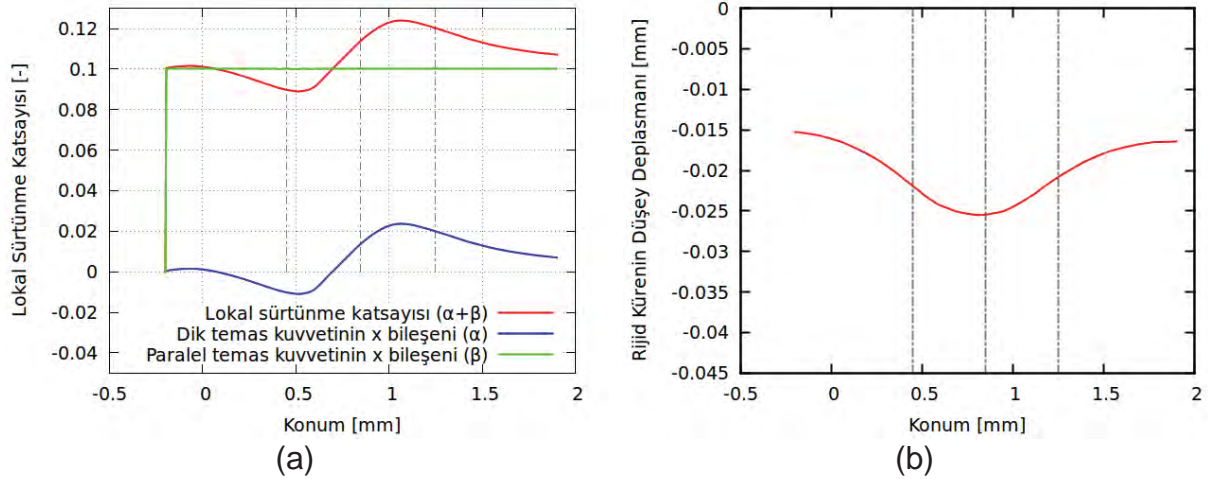
Lokal sürtünme katsayısındaki bu dalgalanma Şekil 117'deki görsel aracılığı ile açıklanabilir. Şekil 117'de F düşey kuvvetine maruz kalan kürenin teması sonucu deforme olan elastik bir katı ve temas bölgesinde küreye uygulanan dik kuvvetler görülmektedir. Katının A ve B bölgeleri aynı elastik özelliklere sahip ise kürede yüklemenin ve malzemenin simetrisinden ötürü x yönünde herhangi bir hareket beklenmez. Ancak eğer B bölgesi A bölgesinden daha yumuşak ise, B bölgesinde oluşan kuvvetlerin toplamının A bölgesindekilerden küçük olması nedeniyle küre B bölgesine doğru hareketlenir. B bölgesindeki malzemenin iyice yumuşatılmasının neticesinde B bölgesi hiç bir karşı kuvvet göstermeyen bir çukur olarak düşünülebilir. Lokal sürtünme katsayısının herhangi bir boş çukura ya da içerisi yumuşak malzemeye doldurulmuş çukura yaklaşırken düşüş göstermesi bu mekanizma ile açıklanabilir. Lokal sürtünme katsayısındaki düşüşü takip eden artış ise rijit kürenin yumuşak ya da boş olan bölgeden sonra gelen sert olan A bölgesi ile temasa geçmesindedir.



Şekil 117. F düşey kuvvetine maruz kalan kürenin teması sonucu deforme olan yüzeyler için küreye etkiyen dik temas kuvvetleri kuvvetler (a) A ve B bölgelerinin kesme modülleri eşit (b) A bölgesinin kesme modülü B bölgesininkinden büyük iken

Bilindiği üzere, temas kuvvetleri yüzeye paralel ve yüzeye dik olan bileşenlerine ayrılabilir. Yüzeye dik olan bileşenler temasın basınç-açıklık ilişkisinden kaynaklanırken, yüzeye paralel olan bileşenler temasın basınç-sürtünme ilişkisinden kaynaklanır. Yüzeye sırasıyla dik ve paralel olan bu iki kuvvetin x yönündeki bileşenlerinin toplamının düşey kuvvete bölünmesi ile sürtünme katsayısı bulunabilir. UYMAPE şekil değiştirebilen bir malzeme olarak modellendiği için deformasyonun neticesinde UYMAPE'in yüzeyine dik olan kontak kuvvetlerinin x-bileşenleri sıfırdan farklı değerler almaya başlar. Şekil 118(a)'da yüzeye paralel ve dik olan temas kuvvetlerinin x yönündeki bileşenlerinin toplam sürtünme katsayısındaki payları görülmektedir. Şekil 118(a)'da yüzeye dik olan temas kuvvetinin, lokal sürtünme katsayısında çukurdan kaynaklanan değişimi belirleyen kuvvet olduğu görülmektedir. Lokal sürtünme katsayısının azaldığı bölgede, yüzeye dik olan temas kuvvetleri toplamının yönü değişmektedir. Sürtünme kuvvetinin azaldığı bölgede bu kuvvet, küreyi ilerleme yönünde iterken, çukursuz yüzeye yakınsanan bölgede kürenin ilerlemesini güçleştirici yönde etki etmektedir.

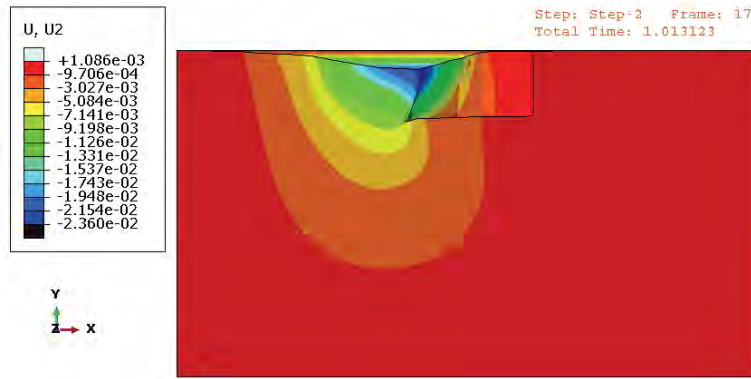
Şekil 118(b)'de kürenin düşey deplasmanının, kürenin merkezinin konumuna bağlı değişimi görülmektedir. Şekil 118(b)'de kürenin merkezinin çukurun orta noktasına ulaşmasına kadar kürenin alçaldığı, bu noktadan sonra ise yükseldiği görülmektedir.



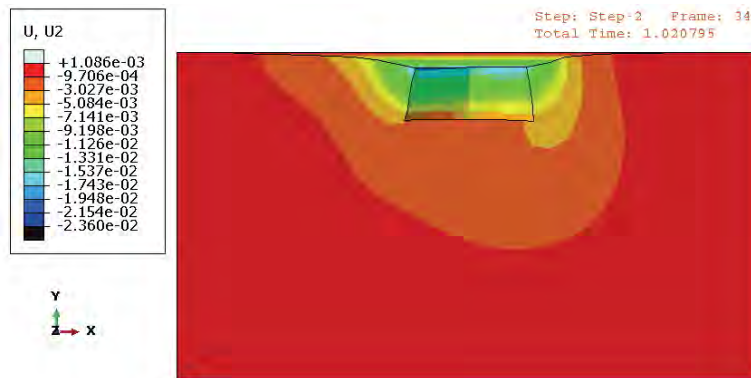
Şekil 118. 1x1'lik desen için (a) yüzeye paralel ve dik temas kuvvetlerinin sürtünme kuvvetine katkısı (b) kürenin düşey deplasmanının küre merkezinin konumu ile değişimi

Şekil 119'da arasında 1x1'lik desen için rijit kürenin merkezinin x-koordinatının çukurun başladığı noktaya, çukurun merkezine ve çukurun bittiği noktaya geldiği durumlardaki UYMAPE'in şekil değiştirmiş hali verilmektedir. Bu üç durum Şekil 118(a) ve (b)'deki düşey kesikli çizgilerle belirtilmiş olan konumlara karşı gelmektedir. Şekillerde kontur olarak şekil değiştirmenin düşey bileşeni (rijit kürenin üzerine sabit kuvvet uygulanan yön) gösterilmiş ve şekil değiştirmeler 5 kat büyütülerek gösterilmiştir.

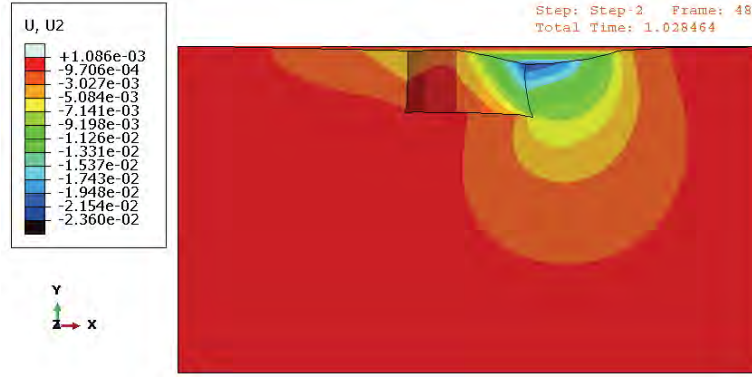
Şekil 120'de 2x2 ve 3x3'lük desenlerde boş çukurları olan yüzeylerin lokal sürtünme katsayıları verilmiştir. Şekil 120'deki çukursuz etiketli eğriler, çukur bulunmayan yüzeye ait lokal sürtünme katsayılarına aittir. Çukurların baş, orta ve son noktaları, Şekil 116'da 1x1'lik desen için yapıldığı gibi, Şekil 120'de dikey kesikli çizgiler ile işaretlenmiştir. Şekil 120'de Şekil 116'dakine benzer biçimde lokal sürtünme kuvvetinde bir dalgalanma olmasına rağmen bu dalgalanmada her bir çukurun etkisinin ayrı ayrı takip edilemediği görülmektedir. 2x2 ve 3x3'lük desenlerde Şekil 110'da görüleceği üzere çukurlar arası mesafe kısalmakta ve kayma yönüne dik olan z yönünde birden fazla çukur bulunmaktadır. Temas bölgesinde birden fazla çukur bulunması Şekil 120'de çukurların etkisinin üst üste binerek ayırt edilememesine sebep olabilir. Temas bölgesinde birden fazla çukur olan deneylerin yapıldığı bir çalışmada da (Meine vd., 2002a) sürtünme kuvveti eğrilerinde çukurların etkisinin ayrı ayrı ayırt edilemediği görülmüştür.



(a) Çukurun başlangıcı

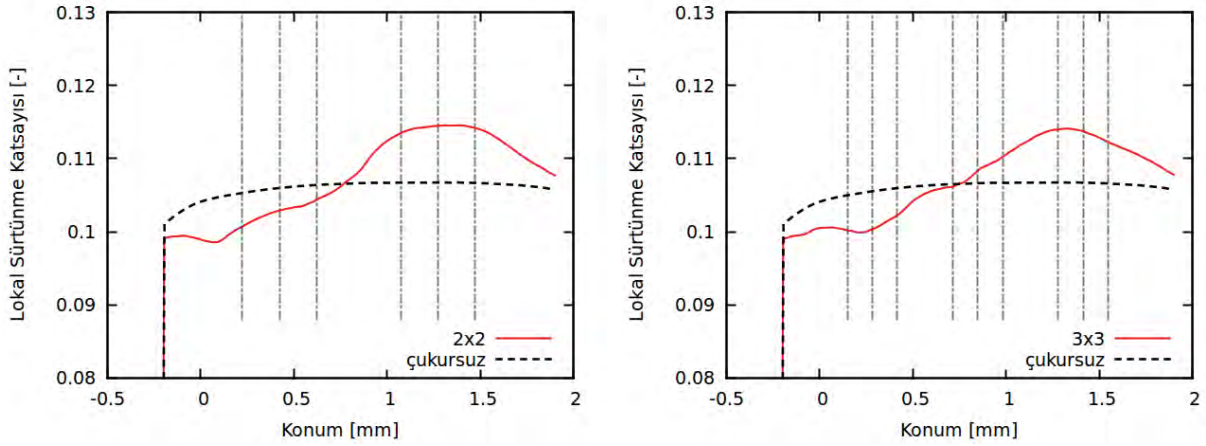


(b) Çukurun ortası



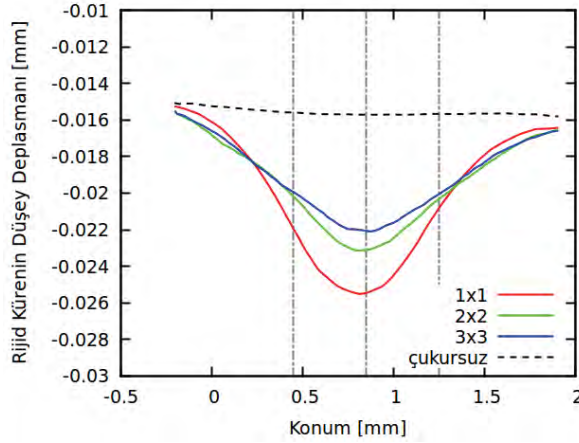
(c) Çukurun sonu

Şekil 119. Kürenin merkezinin x-koordinatının, sürüklenme güzergahı boyunca çukurun belirli noktalarında bulunduğu durum için UYMAPE parçanın şekil değiştirmiş ağında düşey deplasman bileşenlerinin dağılımı. Deformasyonlar 5 kat büyütülmüştür.



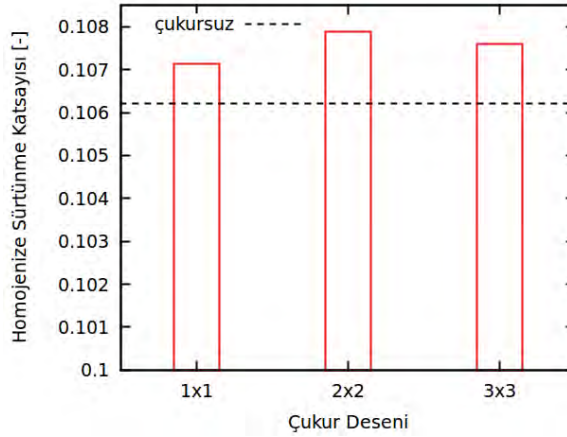
Şekil 120. 2x2 ve 3x3'lük desende 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzey için lokal sürtünme katsayısının kürenin konumu ile değişimi

Şekil 121'de farklı çukur desenleri için kürenin düşey deplasmanının, kürenin merkezinin konumuna bağlı değişimi verilmiştir. Çukurların yüzey alanları toplamı tüm çukur desenleri için Bölüm 3.4.2'de belirtildiği üzere eşittir. Şekil 121'de çaplarının düşmesi ile düşey deplasman miktarlarının azaldığı görülmektedir. 3x3'lük desen için Kürenin merkezinin x-koordinatının, sürüklenme güzergahı boyunca çukurların belirli noktalarına geldiği anlar için deforme olmuş görünüm, 1x1'lik desen için Şekil 119'daki gibi, 7. Bölüm olan Ekler'de Şekil 136'da verilmiştir.



Şekil 121. 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip ilerleyen kürenin, ilerleme güzergahı boyunca düşey deplasmanının, çukur desenine bağlı değişimi

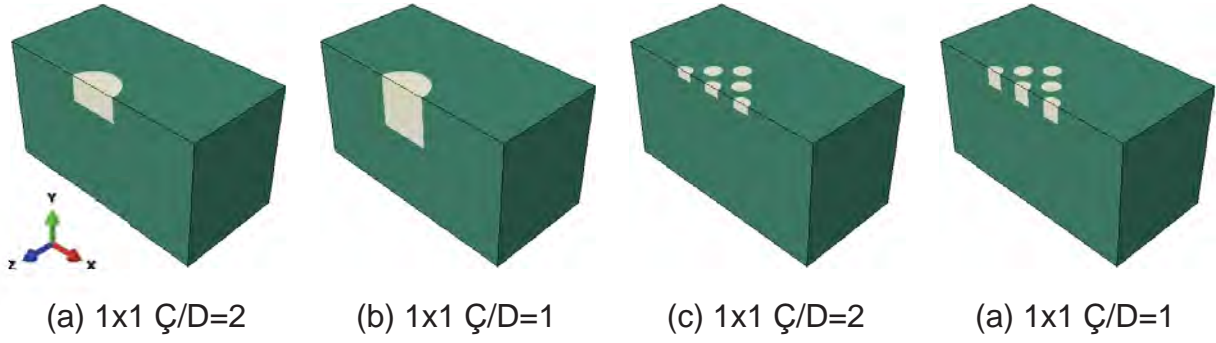
1x1, 2x2 ve 3x3'lük desenli yüzeylerin homojenize sürtünme katsayıları çukursuz yüzeyin homojenize sürtünme katsayısı ile karşılaştırmalı olarak Şekil 122'de verilmiştir. Şekil 122'de tüm desenler için sürtünme katsayısının çukursuz durumdan daha yüksek olduğu görülmektedir. Sürtünme katsayısını olumsuz yönde en az etkileyen desen 1x1'lik desen olmuştur.



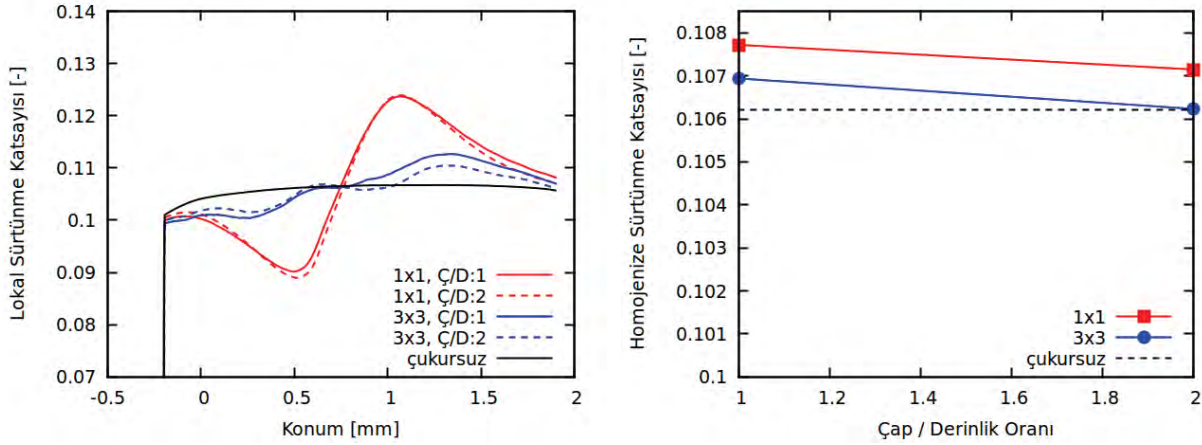
Şekil 122. 0.4 mm derinliğinde boş çukurlara sahip yüzeyler için homojenize sürtünme katsayısının çukur deseni ile değişimi ve çukursuz yüzey sürtünme katsayısı ile karşılaştırması

4.2. Çukurların Çap / Derinlik Oranlarının Etkisi

Şekil 123'te görüldüğü gibi, çukur çapları sabit tutulurken derinliklerin değiştirilmesi ile farklı çap / derinlik (Ç/D) oranlarına sahip çukurlar elde edilmiştir. Şekil 123'te çukurlar boştur, ayırt edilebilirliğin artması için farklı renkte gösterilmektedir. Boş çukurlar için, çap/derinlik oranının lokal sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi Şekil 124'te verilmiştir. Şekil 124'te çap/derinlik oranının büyümesinin, lokal sürtünme katsayısı eğrilerinin şeklini fazla etkilemeden, homojenize sürtünme katsayısını düşürdüğü görülmektedir.



Şekil 123. Sonlu elemanlar modelinin 1x1 ve 3x3 çukur desenleri ve farklı çap/derinlik oranları için enkesit görünümü, (Çukurlar boştur, ayırt edilebilirliğin artması için farklı renkte gösterilmektedir.)

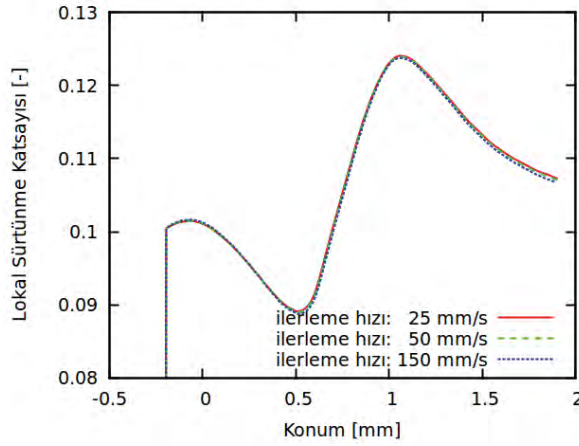


Şekil 124. 1x1 ve 3x3'lük desenlerdeki boş olan çukurların çap/derinlik oranının lokal ve homojenize sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi

4.3. Yükleme Hızının Etkisi

UYMAPE'in modellemesinde kullanılan Bergstrom ve Bischoff (2010) malzeme modeli viskoplastik olduğu için malzemenin davranışı yükleme hızına bağlıdır. Normalde 50 mm/s hız ile ilerletilen kürenin ilerleme hızının lokal sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi 1x1'lik desende $\text{Ç/D}=2$ çap/derinlik oranına sahip boş çukur barındıran yüzey için yapılmıştır. Küre ilerleme hızının 25 mm/s'ye indirilmesinin ya da 150 mm/s'ye çıkarılmasının lokal sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi Şekil 125'teki gibidir. Kürenin UYMAPE'e 17N düşey kuvvetle bastırılma hızı tüm analizler için aynı olup, 17N'luk düşey kuvvet 1 saniye içerisinde etki ettirilmektedir. Şekil 125'te kürenin ilerleme hızının büyük bir etkisi olmadığı görülmektedir. Malzeme modelinin aldığı orijinal çalışmada verilen farklı yükleme hızlarındaki basit çekme ve basma deneylerinde de UYMAPE'in gerilim-gerinim eğrilerinin yükleme hızından fazla

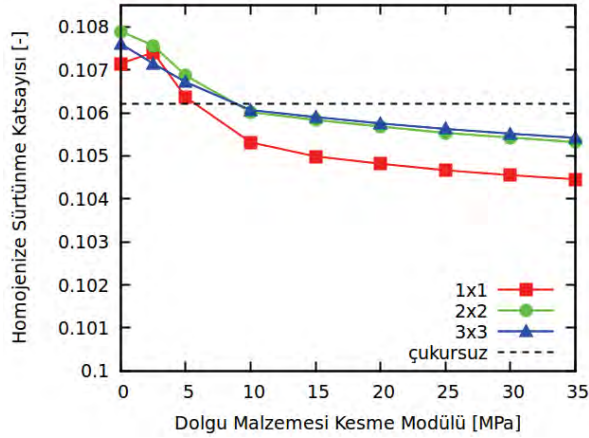
etkilenmediği gösterilmiştir, bkz. Bergstrom ve Bischoff (2010). Bu bağlamda Şekil 125'teki sonuçlar şaşırtıcı değildir.



Şekil 125. 1x1'lik desende $\text{Ç}/\text{D}=2$ çap derinlik oranına sahip boş çukurlar barındıran yüzey için yükleme hızının lokal sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi

4.4. Çukurların Neo-Hookean Bünye Denklemi İle Tanımlanan Dolgu Malzemesi İle Doldurulması

Çukurlar, sonlu elemanlar ağlarında var olan elemanlar değiştirilmeden, çukur içlerine mekanik özellikleri Neo-Hookean elastik bünye denklemi ile tanımlı yeni elemanlar eklenerek doldurulmuştur. Dolgu malzemesinin hacim modülü ve çukurların derinlikleri sırasıyla, 2200MPa ve 0.4 mm olarak alınmıştır. Neo-Hookean dolgu malzemesi ile rijit küre arasındaki sürtünme katsayısı rijit küre ile UYMAPE arasındakine benzer şekilde 0.1 olarak alınmıştır. Homojenize sürtünme katsayısının, çukur dolgu malzemesinin kesme modülü ile değişimi farklı çukur desenleri için Şekil 126'da verilmiştir. Şekil 126'da dolgu malzemesi kesme modülünün sıfır olarak işaret edildiği değerler, çukurların boş olduğu durum için elde edilmiştir. Şekil 126'da çukurların doldurulması ile yüzeyin sürtünme katsayısının çukursuz yüzey için olan katsayının altına inemediği tüm desenler için görülmektedir. En düşük sürtünme katsayılarının 1x1'lik desen için elde edildiği Şekil 126'da görülmektedir.

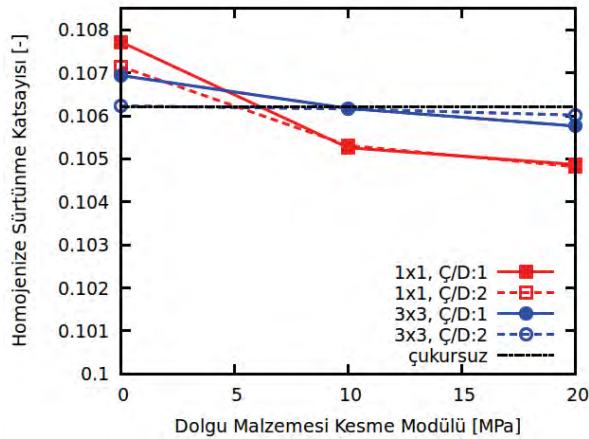


Şekil 126. Homojenize sürtünme katsayısının çukur deseni ve dolgu maddesi kesme modülü ile değişimi

Çukurların çap/derinlik oranlarındaki değişimin homojenize sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi, farklı dolgu maddesi kesme modülleri için Şekil 127’de verilmiştir.

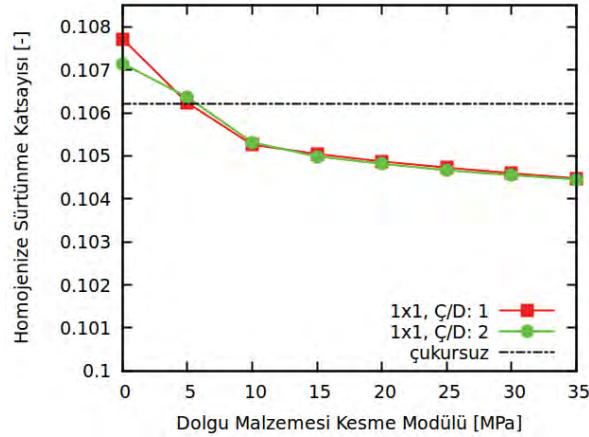
4.4.1. Dolu Çukurların Çap / Derinlik Oranlarının Etkisi

Neo-Hookean katısı ile dolu olan çukurların çap / derinlik oranları (Ç/D) Bölüm 4.2’deki gibi değiştirilmiştir. Şekil 127’de homojenize sürtünme katsayısının dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi farklı Ç/D oranlarına ve çukur desenlerine sahip yüzeyler için verilmiştir. Şekil 127’de dolgu malzemesi kesme modülünün sıfır olarak işaret edildiği değerler, çukurların boş olduğu durum için elde edilmiştir. Şekil 127’de çukurların boş olduğu durum için, Ç/D=2 oranına sahip 3x3’lük desenin en düşük sürtünme katsayısını verdiği görülmektedir. Ancak, bu alternatifin dolgulu versiyonu için homojenize sürtünme katsayısında kayda değer bir iyileşme görülmemektedir. Şekil 127’de çukurlar dolgu maddesi ile doldurulduğunda en düşük sürtünme katsayısına 1x1’lik desenli yüzeylerin sahip olduğu görülmektedir.



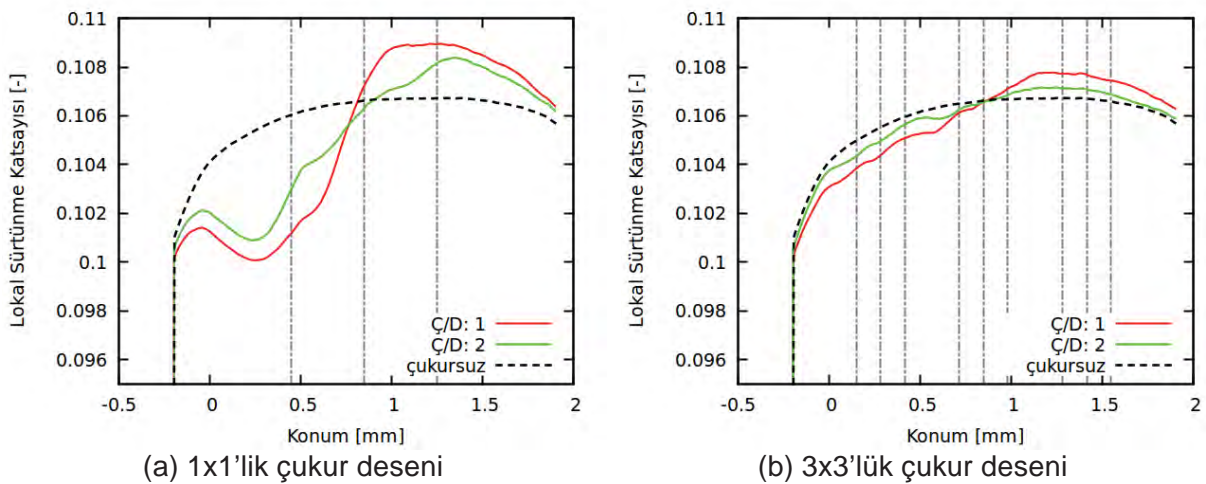
Şekil 127. Homojenize sürtünme katsayısının, farklı çukur desenleri ve çap/derinlik oranları için dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi

1x1'lik desende çukurlar barındıran yüzeyin homojenize sürtünme katsayısının, farklı çap / derinlik oranları için dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi Şekil 128'de verilmiştir. Şekil 128'de dolgu malzemesi kesme modülü arttıkça homojenize sürtünme katsayısının azaldığı ve 5 MPa'dan daha büyük dolgu kesme modülü değerleri için çap / derinlik oranının etkisinin önemsiz olduğu görülmektedir.



Şekil 128.1x1'lik desende çukurlar barındıran yüzeyin homojenize sürtünme katsayısının, farklı çap / derinlik oranları için dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi

1x1'lik ve 3x3'lük desenlerin farklı çap / derinlik oranları için lokal sürtünme katsayısı eğrileri sırasıyla Şekil 129(a) ve Şekil 129(b)'de verilmiştir. Her iki grafikte de Ç/D oranındaki artışın eğrilerin lokal maksimum ve minimum değerlerini birbirlerine yaklaştırarak, dalgalanma miktarını azalttığı görülmektedir.



Şekil 129. Kesme modülü 10 MPa olan dolgu malzemesi ile doldurulmuş çukurları farklı desene çap/derinlik oranlarına sahip yüzeylerin, lokal sürtünme katsayılarının küre ilerleme güzergahı boyunca değişimi

En düşük sürtünme katsayılarının çukurların hem boş (bkz. Şekil 122) hem de dolu (bkz. Şekil 127) olduğu durumlarda 1x1'lik desende görülmesinden ötürü bu bölümden sonraki tüm parametrik çalışmalar 1x1'lik desen üzerinde yapılmıştır.

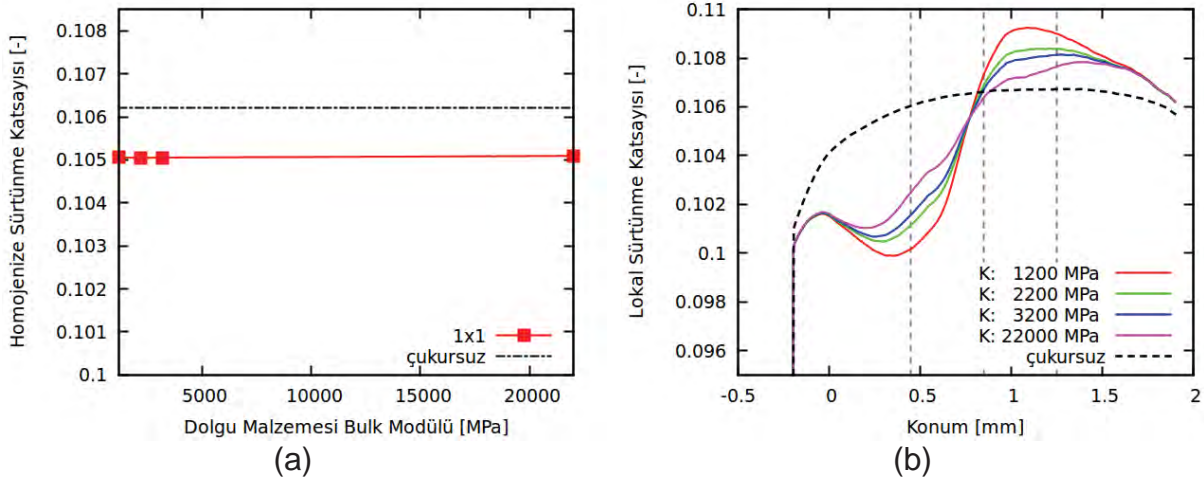
4.4.2. Neo-Hookean Dolgu Malzemesi Bünye Denklemi Sabitlerinin Etkileri

Neo-Hookean bünye denklemi iki adet malzeme parametresi ile tanımlanır. Bunlar, hacim modülü ve kesme modülü olarak seçilebilir. Bu bölümde $\text{Ç/D}=1$ çap derinlik oranına sahip 1x1'lik desendeki çukurların, Neo-Hookean bünye denklemini kullanan malzeme ile doldurulduğu durumda, malzeme parametrelerinin sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi incelenmiştir.

Dolgu Malzemesi Hacim Modülünün Etkisi

Dolgu malzemesi kesme modülünün 20 MPa olarak alındığı, çap / derinlik oranının 1 olduğu 1x1'lik desen için dolgu malzemesi hacim modülünün lokal ve homojenize sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi Şekil 130'da verilmiştir.

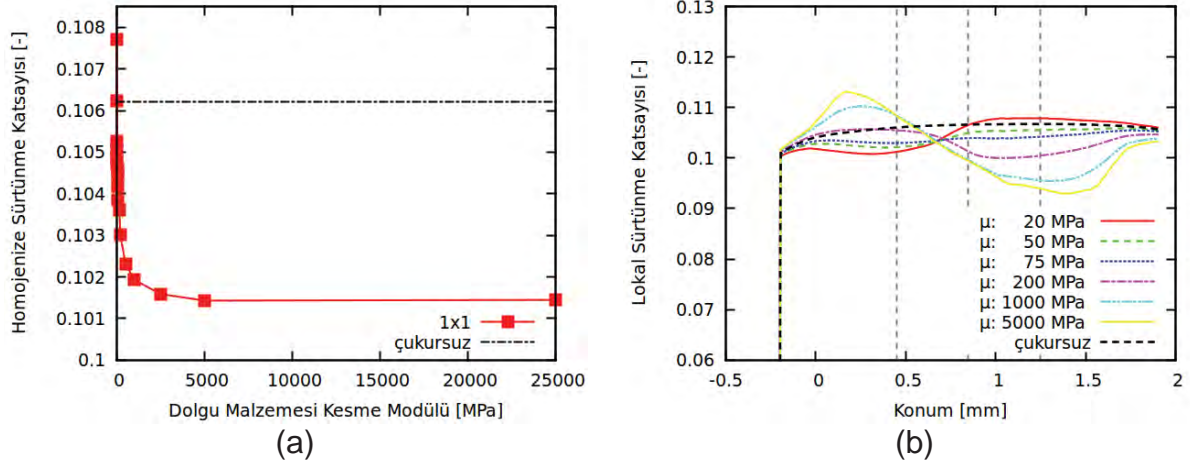
Şekil 130(a)'da hacim modülünün homojenize sürtünme katsayısı üzerinde kayda değer bir etkisi olmadığı görülmektedir. Lokal sürtünme katsayısı ise, Şekil 130(b)'de görüldüğü gibi hacim modülü arttıkça, çukurun ortasına kadar artmakta, çukur ortasından sonra ise azalmaktadır. Artan hacim modülü ile, lokal sürtünme katsayısı eğrilerinin lokal maksimum ve minimum değerleri birbirlerine yaklaşarak, eğrideki dalgalanma azalmaktadır.



Şekil 130. $\text{Ç/D}=1$ oranlarına sahip 1x1'lik desenli $2\mu=20\text{MPa}$ dolgu malzemesi ile dolu çukurları bulunan yüzeyin (a) homojenize ve (b) lokal sürtünme katsayılarının dolgu malzemesi bulk modülü ile değişimi

Dolgu Malzemesinin Kesme Modülünün Etkisi

Dolgu malzemesi hacim modülünün 2200 MPa olarak alındığı, çap / derinlik oranının 1 olduğu, 1x1'lik desen için dolgu malzemesi kesme modülünün lokal ve homojenize sürtünme katsayıları üzerindeki etkisi Şekil 131'de verilmiştir. Şekil 131(a)'da kesme modülü arttıkça homojenize sürtünme katsayısının düştüğü görülmektedir.



Şekil 131. $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranlarına sahip 1x1'lik desenli $K=2200$ MPa dolgu malzemesi ile dolu çukurları bulunan yüzeyin (a) homojenize ve (b) lokal sürtünme katsayılarının dolgu malzemesi kesme modülü ile değişimi

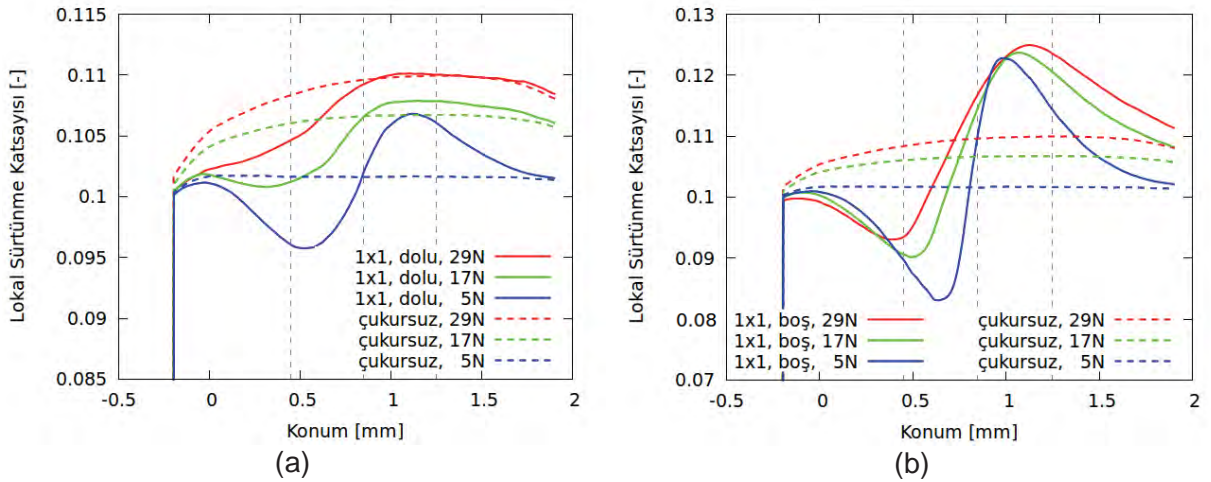
Şekil 131(b)'de kesme modülünün düşük değerleri için lokal sürtünme katsayısının minimum değerleri çukurun başlangıç noktasına yakın bir noktada görülmektedir. Ancak, dolgu malzemesi kesme modülünün 200 MPa ve üzeri gibi çok yüksek değerleri için lokal minimumlar çukurun bitiş noktasına yakın bölgede görülmektedir. UYMAPE'in kesme modülleri Tablo 8'de görüldüğü üzere 200 MPa mertebesindedir. Dolayısı ile, davranış değişikliği dolgu malzemesinin kesme modülünün UYMAPE'in kesme modülüne yaklaştığı ya da aştığı değer aralığında oluşmaktadır. Bu durumda, matematiksel modelimizde, çukurlu ve çukursuz bölgelerin rol değiştirdikleri söylenebilir. Dolgu malzemesinin hacim korunumlu deformasyonunun UYMAPE'den daha sert olduğu durumda; çukurlu bölge çukursuz, çukursuz bölge ise çukur gibi davranmaktadır. Bu istisnai durum, ve bu durum için Şekil 131(a)'da görülen homojenize sürtünme katsayısındaki düşüş, UYMAPE ve dolgu kesme modülünün arasındaki farkın, çukurlu yüzeylerin sürtünme mekanizmasında önemli bir rol oynadığını işaret etmektedir.

4.4.3. Düşey Yük Seviyesinin Dolu ve Boş Çukurlar İçin Etkisi

Sürüklenme boyunca küreye uygulanan 17N'luk düşey kuvvetin değiştirilmesinin çukursuz yüzeyler ile dolu ve boş çukurları bulunan yüzeylerdeki etkisi bu bölümde incelenmiştir.

Çalışma $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranına sahip 1×1 desendeki çukurlar üzerinde yapılmıştır. UYMAPE için Bergstrom ve Boyce (2010) bünye denklemi Tablo 8'deki malzeme sabitleri ile kullanılmıştır. Dolu olduğu belirtilen çukurlar 20 MPa kesme modülü ve 2200 MPa hacim modülü parametreleri ile tanımlanan Neo-Hookean katısı ile doludur.

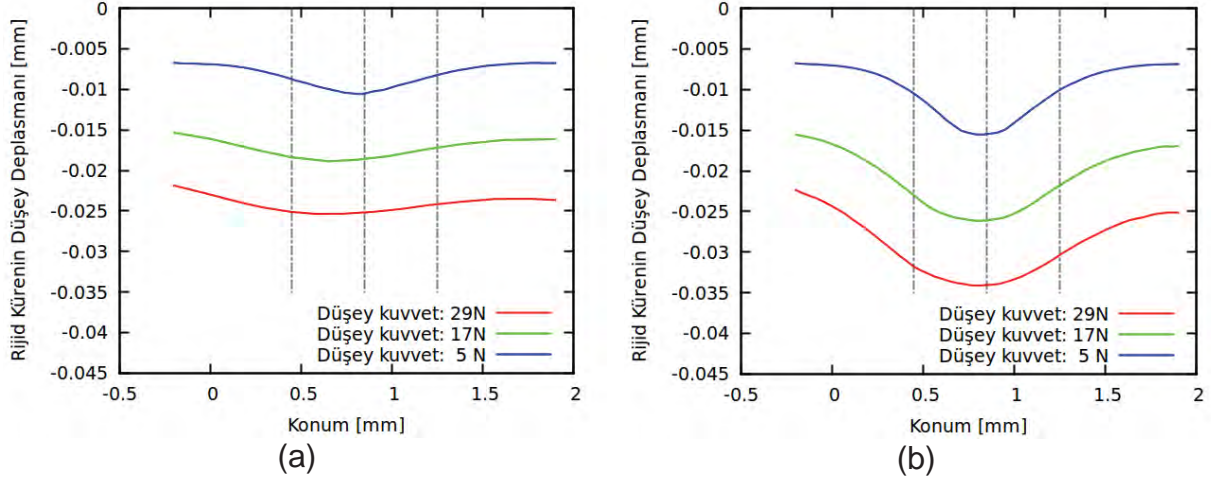
Lokal sürtünme katsayısı eğrileri çukurları dolu ve boş olan yüzeyler için sırasıyla Şekil 132(a) ve Şekil 132(b)'de farklı düşey yük seviyeleri için verilmiştir. Çukursuz yüzeylerin lokal sürtünme katsayısı eğrileri de karşılaştırma amacıyla Şekil 132(a) ve Şekil 132(b)'de yer almaktadır. Şekil 132(a)'da çukursuz yüzeyler için lokal sürtünme katsayısının düşey yük seviyesinin azalması ile 0.1 olarak aldığımız Coulomb sürtünme katsayısına yakınsadığı görülmektedir. Dolu çukurlarda düşey kuvvetin artması ile Şekil 132(a)'da lokal sürtünme katsayısının; en düşük değerinin arttığı, en yüksek değerinin ise çukursuz yüzeydeki değerine yaklaştığı görülmektedir. Boş çukurlar için ise, düşey yük seviyesi arttıkça hem en düşük hem de en yüksek lokal sürtünme katsayılarının artmakta olduğu Şekil 132(b)'de görülmektedir. Şekil 132(b)'de yük seviyesi arttıkça en düşük lokal sürtünme katsayısı konum bakımından daha erken, en yüksek sürtünme katsayısı ise daha geç görülmektedir. Şekil 132(a) ve Şekil 132(b) aynı düşey yük seviyeleri için karşılaştırıldığında, sürtünme katsayısındaki dalgalanma büyüklüğünün boş çukurlarda dolulara kıyasla daha yüksek olduğu görülmektedir.



Şekil 132. $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranlarına sahip 1×1 'lik desenli (a) dolu ve (b) boş çukurları bulunan yüzeyler için lokal sürtünme katsayılarının düşey yük seviyesi ile değişimi

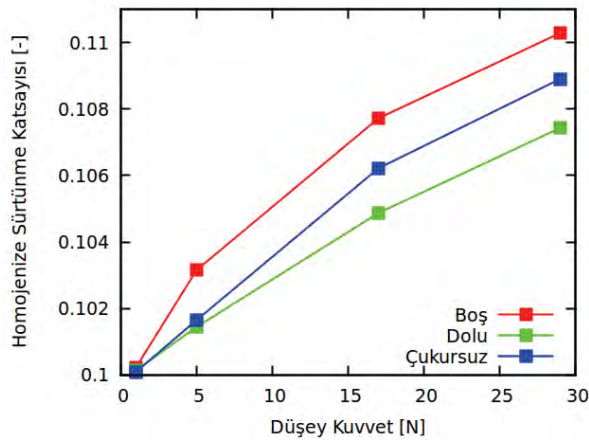
Şekil 133(a) ve Şekil 133(b)'de sırasıyla dolu ve boş çukurlar için, kürenin düşey deplasmanının ilerleme güzergahı boyunca değişimi verilmiştir. Dolu çukurlar için olan Şekil 133(a)'da düşey yük arttıkça, kürenin düşey deplasmanındaki değişimin azaldığı ve lokal minimum konumunun çukur ortasından çukur başlangıç noktasına doğru kaydığı görülmektedir. Boş çukurlar için olan Şekil 133(b)'de yük seviyesi arttıkça düşey

deplasmandaki değişiminin daha yumuşak şekilde gerçekleştiği gözlemlenmektedir. Şekil 133(a) ve Şekil 133(b) karşılaştırıldığında dolu olan çukurların düşey deplasman değişiminin daha az olduğu görülmektedir.



Şekil 133. $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranlarına sahip 1x1'lik desenli dolu (a) ve boş (b) çukurları bulunan yüzeyler için kürenin düşey deplasmanının farklı düşey yük seviyeleri için güzergah boyunca değişimi

Homojenize sürtünme katsayılarının düşey kuvvet ile değişimi Şekil 134'te verilmiştir. Şekil 134'te düşey yük arttıkça homojenize sürtünme katsayısının tüm yüzeylerde arttığı görülmektedir. Tüm düşey yük seviyeleri için, dolu çukurlu yüzeyin sürtünme katsayısının çukursuz yüzeye göre daha düşük olduğu görülmektedir. Boş çukurlu yüzeyin sürtünme katsayıları ise tüm yük seviyeleri için çukursuz yüzeydekinden daha yüksektir. Düşey yük seviyesi arttıkça dolu çukurlu yüzeyin sürtünme katsayısı ile çukursuz yüzeyin sürtünme katsayısı arasındaki fark büyümektedir.

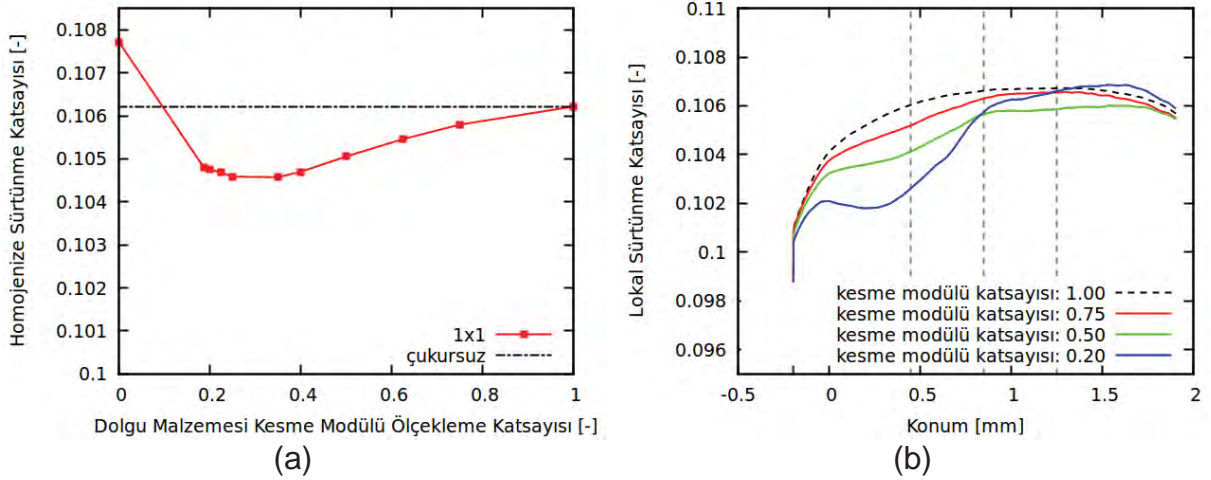


Şekil 134. $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranlarına sahip 1x1'lik desenli dolu ve boş çukurları bulunan yüzeyler ile çukur bulunmayan yüzeylerin homojenize sürtünme katsayılarının düşey yük seviyesi ile değişimi

4.4.4. Dolgu Malzemesinin Farklı Mekanik Özellikli UYMAPE Olarak Modellenmesi

Dolgu malzemesinin Neo-Hookean bünye denklemi yerine, UYMAPE ile aynı bünye denklemini kullanması bu kısımda incelenmiştir. Bu bölümde hem dolgu maddesi hem de onun etrafını saran UYMAPE bölge Bergstrom ve Bischoff (2010)'da önerilen viskoplastik bünye denklemi ile modellenmektedir. UYMAPE'de A, B ve C zincirleri için kesme modülleri Tablo 8'de verildiği gibi sırasıyla 200 MPa, 293 MPa, 10 MPa olarak alınmaktadır. B zincirinin kesme modülü A zincirindeki plastik deformasyona bağlı olarak $\mu_{Bf}=79$ MPa değerine kadar düşmektedir. Dolgu malzemesi için tüm zincirlerin kesme modülleri dolgu malzemesi dışındaki bölgedeki UYMAPE'in kesme modülleri azaltılarak kullanılmıştır. Örneğin A zincirinin Tablo 8'de 200 MPa olarak verilen kesme modülü, dolgu malzemesi için $\frac{1}{4}$ ölçek katsayısı kullanıldığında 50 MPa olarak alınmıştır. Dolgu malzemesinin kesme modülleri dışındaki parametreleri Tablo 8'de verildiği gibi değiştirilmeden kullanılmıştır. Dolgu malzemesi ile rijit küre arasındaki sürtünme katsayısı da rijit küre ile diğer bölgelerin arasındaki katsayıya eşit şekilde 0.1 olarak alınmıştır. Bu şekilde, $\frac{C}{D}=1$ oranına sahip 1x1'lik desende çukurlu kontrol yüzeyi için homojenize ve lokal sürtünme katsayı eğrileri sırasıyla Şekil 135(a) ve (b)'de verilmiştir. Şekil 135(a)'da kesme modülü ölçekleme katsayısının sıfır olduğu nokta için verilen değer çukurların boş olduğu durumdaki değerdir.

Şekil 135(a)'da homojenize sürtünme katsayılarının dolgulu yüzey için, çukursuz yüzeydekinden daha düşük olduğu görülmektedir. Homojenize sürtünme katsayısı, ölçekleme katsayısı ile, ölçekleme katsayısının 0.35 değerine kadar azalmakta, bu değerden sonra ise artmaktadır. Şekil 135(b)'de lokal sürtünme katsayılarının değişimine bakıldığında kesme modülü katsayısı azaldıkça en düşük lokal sürtünme katsayılarının azaldığı, en yüksek sürtünme katsayı değerlerinin ise arttığı görülmektedir. Şekil 135(a) ve Şekil 135(b)'ye bakıldığı zaman dolgu bölgelerini diğer mekanik özellikleri aynı kalırken kesme modülleri normal UYMAPE'in kesme modülünün 35% kadar olan başka bir UYMAPE ile doldurulmasının sürtünme katsayısını azaltmada en etkili durum olduğu görülmektedir.



Şekil 135. $\text{Ç}/\text{D}=1$ oranlarına sahip 1x1'lik desenli çukurları bulunan yüzeyin lokal ve homojenize sürtünme katsayılarının dolgu malzemesinin kesme modülü ile değişimi

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu bölümde, proje kapsamında yapılan çalışmalarda elde edilen sonuçlardan bahsedilecektir.

UYMAPE'in küresel sert bir yüzey ile teması için, UYMAPE yüzeyinde açılacak silindirik çukur biçimli mikro yapıların, sürtünme katsayısı üzerindeki etkisi sonlu elemanlar yöntemi ile araştırılmıştır. Sürtünme kuvvetlerinin azaltılması UYMAPE implantın yüzeyindeki aşınma miktarını azaltacağı için yapılan çalışmalarda sürtünme katsayısının azaltılması amaçlanmıştır. Etkileri incelenen parametreler, çukur çapları, çap / derinlik oranları, kürenin ilerleme hızı, çukurların çukur yan yüzlerine monolitik bağlı farklı malzemeler ile doldurulması ve küreye uygulanan düşey yük seviyesidir.

- Kürenin ilerleme hızının, 25-150 mm/s küre ilerleme hızları arasında, gerek lokal gerekse homojenize sürtünme katsayılarını çok az etkilediği görülmüştür, bkz. Şekil 125.
- Çukur çapı/derinlik oranlarının homojenize sürtünme katsayısına olan etkileri de hem boş çukurlu, hem de içi doldurulmuş çukurlu yüzey dokuları için oldukça düşük düzeydedir, bkz. Şekil 127, Şekil 128. Lokal sürtünme katsayılarına olan etkisi daha belirgin olmakla birlikte genel davranışı fazla değiştirmemektedir, bkz. Şekil 124, Şekil 129.
- UYMAPE'in yüzeyine boş çukurların açılması ile yaratılan yüzey dokusu üzerinde rijit kürenin kayması sırasında lokal sürtünme katsayısının kürenin konumuna bağlı olarak azaldığı ve arttığı görülmüştür bkz. Şekil 116 ve Şekil 120. Fakat boş çukurlu yüzey dokusu olan bütün durumlar için homojenize sürtünme katsayısı yüzey dokusu olmayan durumdan daha yüksek olmaktadır bkz. Şekil 122.

- Yüzey çukurlarının içleri iki tip malzeme ile doldurularak incelenmiştir. İlk çalışmada çukurların içine Neo-Hookean elastik malzemesi konulmuş ve bu malzemenin iki elastik parametresinin (kesme ve hacim modülü) değişiminin sürtünme katsayısına olan etkisi araştırılmıştır.
 - Hacim modülünün lokal sürtünme katsayısını kısıtlı miktarda etkilediği görülmekle birlikte (bkz. Şekil 130(b)), homojenize sürtünme katsayısını neredeyse hiç etkilemediği görülmektedir (bkz. Şekil 130(a)).
 - Kesme modülünün gerek lokal gerekse de homojenize sürtünme katsayıları üzerinde önemli bir etkisi bulunmaktadır. Lokal sürtünme katsayısının konuma bağlı değişimi kesme modülünün değerine bağlı olarak farklı davranışlar göstermektedir (bkz. Şekil 131(b)). Homojenize sürtünme katsayısı kesme modülünün artışına bağlı olarak azalmakta ve bir limit değere yakınsamaktadır.
- Yüzey çukurlarının doldurulduğu ikinci çalışmada ise dolgu malzemesi olarak UYMAPE'yi temsilen Bergström ve Bischoff (2010) modeli kullanılmış ve bu modeldeki kesme modülünün etkisi incelenmiştir. Neo-Hookean malzeme için yapılan çalışmada hacim modülünün etkisinin az olduğu görüldüğü için bu kısımda hacim modülü değişimi incelenmemiştir. Dolgu malzemesinin kesme modülünün, dolgu malzemesini çevreleyen UYMAPE'e göre %70 mertebesinde azaltılmasının homojenize sürtünme katsayısını en etkili şekilde düşürdüğü görülmüştür, bkz. Şekil 135.
- UYMAPE'in yapısındaki çapraz bağ miktarı maruz kaldığı radyasyon dozuna bağlı olarak artmaktadır. Çapraz bağ miktarının artışına paralel olarak, UYMAPE'in kesme modülünün de arttığı bilinmektedir. Bu bağlamda, farklı dozlarda radyasyona maruz kalmış UYMAPE'in kullanıldığı, belli yüzey dokusuna sahip, sürtünme katsayısı düşürülmüş implantların tasarımının mümkün olduğu düşünülmektedir.

6. Kaynaklar

- Ahzi, S., Lee, B. J., Asaro, R. J. 1994. "Plasticity and anisotropy evolution in crystalline polymers", *Materials Science and Engineering: A*, 189(1), 35-44.
- Alvarado-Contreras, J. A., Polak, M. A., Penlidis, A. 2010. "Constitutive modeling of damage evolution in semicrystalline polyethylene", *Journal of Engineering Materials and Technology*, 132(4), 041009.
- Argon, A. S., Galeski, A., Kazmierczak, T. 2005. "Rate mechanisms of plasticity in semi-crystalline polyethylene", *Polymer*, 46(25), 11798-11805.
- Arruda, E. M., Boyce, M. C. 1993. "A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(2), 389-412.
- Arruda, E.M., Boyce, M.C., 1993. "A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials." *J. Mech. Phys. Solids* 41, 389–412.
- Avanzini, A. 2008. "Mechanical characterization and finite element modelling of cyclic stress-strain behaviour of ultra high molecular weight polyethylene", *Materials Design*, 29(2), 330-343.
- Ayoub, G., Zaïri, F., Naït-Abdelaziz, M., Gloaguen, J. M. 2010. "Modelling large deformation behaviour under loading-unloading of semicrystalline polymers: application to a high density polyethylene", *International Journal of Plasticity*, 26(3), 329-347.
- Bartczak, Z., Argon, A. S., Cohen, R. E. 1992. "Deformation mechanisms and plastic resistance in single-crystal-textured high-density polyethylene", *Macromolecules*, 25(19), 5036-5053.
- Bartczak, Z., Argon, A. S., Cohen, R. E. 1992. "Deformation mechanisms and plastic resistance in single-crystal-textured high-density polyethylene", *Macromolecules*, 25(19), 5036-5053.
- Bartczak, Z., Galeski, A. 2010. "Plasticity of semicrystalline polymers", In *Macromolecular symposia*, 294(1), 67-90.
- Bazant, Z.P., B.H. Oh. 1986 "Efficient numerical integration on the surface of a sphere." *Z. Angew. Math. Mech.* 66, 37-49
- Berger, R. A., Rosenberg, A. G., Barden, R. M., Sheinkop, M. B., Jacobs, J. J., Galante, J. O. 2001. "Long-term followup of the Miller-Galante total knee replacement", *Clinical orthopaedics and related research*, 388, 58-67.
- Bergström, J. S., Kurtz, S. M., Rimnac, C. M., Edidin, A. A. 2002. "Constitutive modeling of ultra-high molecular weight polyethylene under large-deformation and cyclic loading conditions", *Biomaterials*, 23(11), 2329-2343.
- Bergström, J. S., Rimnac, C. M., Kurtz, S. M. 2003. "Prediction of multiaxial mechanical behavior for conventional and highly crosslinked UHMWPE using a hybrid constitutive model", *Biomaterials*, 24(8), 1365-1380.
- Bergström, J. S., Rimnac, C. M., Kurtz, S. M. 2004. "An augmented hybrid constitutive model for simulation of unloading and cyclic loading behavior of conventional and highly crosslinked UHMWPE", *Biomaterials*, 25(11), 2171-2178.

- Brooks, N. W. J., Mukhtar, M. 2000. "Temperature and stem length dependence of the yield stress of polyethylene", *Polymer*, 41(4), 1475-1480.
- Callister, W. D., Rethwisch, D. G. 2007. "Materials science and engineering: an introduction", New York, Wiley.
- Cho, C. H., Murakami, T., Sawae, Y., Sakai, N., Miura, H., Kawano, T., Iwamoto, Y. 2003. "Elasto-plastic contact analysis of an ultra-high molecular weight polyethylene tibial component based on geometrical measurement from a retrieved knee prosthesis", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Part H, Journal of engineering in medicine*, 218(4), 251-259.
- Crist, B., Fisher, C. J., & Howard, P. R. 1989. "Mechanical properties of model polyethylenes: tensile elastic modulus and yield stress", *Macromolecules*, 22(4), 1709-1718.
- Crist, B., Fisher, C. J., Howard, P. R. 1989. "Mechanical properties of model polyethylenes: tensile elastic modulus and yield stress", *Macromolecules*, 22(4), 1709-1718.
- Danielsson, M., Parks, D. M., Boyce, M. C. 2002. "Three-dimensional micromechanical modeling of voided polymeric materials". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(2), 351-379.
- Darras, O., Seguela, R. 1993. "Tensile yield of polyethylene in relation to crystal thickness", *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 31(7), 759-766.
- de Souza Neto, E. A., Peric, D., Owen, D. R. J. 2008. "Computational methods for plasticity: theory and applications". Singapore, John Wiley & Sons.
- Doi, M., Edwards, S.F., 1986. "The Theory of Polymer Dynamics". Oxford, Clarendon Press.
- Dreinhöfer, K. E., Dieppe, P., Stürmer, T., Gröber-Grätz, D., Flören, M., Günther, K. P., ... Brenner, H. 2006. "Indications for total hip replacement: comparison of assessments of orthopaedic surgeons and referring physicians". *Annals of the rheumatic diseases*, 65(10), 1346-1350.
- Drozdov, A. D. 2003. "A model for the elastoplastic behavior of isotactic poly (propylene) below the yield point," *Macromolecular Materials and Engineering*, 288(2), 164-174.
- Dusunceli, N., Colak, O. U. 2006. "High density polyethylene (HDPE): Experiments and modeling", *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 10(4), 331-345.
- Farrar, D. F., Brain, A. A. 1997. "The microstructure of ultra-high molecular weight polyethylene used in total joint replacements", *Biomaterials*, 18(24), 1677-1685.
- Fisher, J., Jennings, L. M., Galvin, A. L., Jin, Z. M., Stone, M. H., Ingham, E. 2010. "2009 Knee Society presidential guest lecture: polyethylene wear in total knees", *Clinical Orthopaedics and Related Research®*, 468(1), 12-18.
- Fouad, H. 2011. "In vitro evaluation of stiffness graded artificial hip joint femur head in terms of joint stresses distributions and dimensions: finite element study", *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 22(6), 1589-1598.
- Galeski, A. 2003. "Strength and toughness of crystalline polymer systems", *Progress in Polymer Science*, 28(12), 1643-1699.
- Gautam, S., Balijepalli, S., Rutledge, G. C. 2000. "Molecular simulations of the interlamellar phase in polymers: effect of chain tilt", *Macromolecules*, 33(24), 9136-9145.

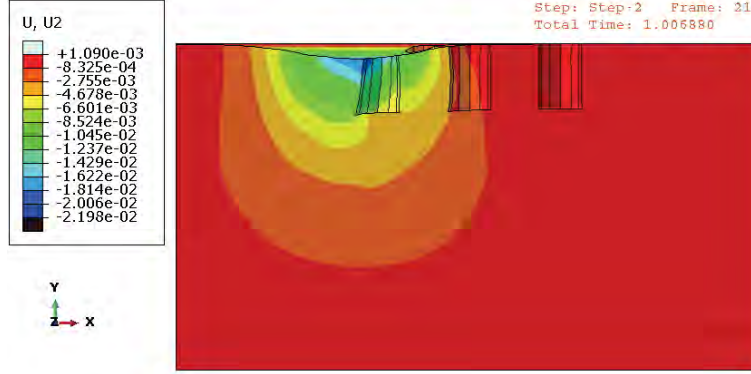
- G'sell, C., & Dahoun, A. (1994). Evolution of microstructure in semi-crystalline polymers under large plastic deformation. *Materials Science and Engineering: A*, 175(1), 183-199.
- Uchida, M., Tada, N. 2013. "Micro-, meso-to macroscopic modeling of deformation behavior of semi-crystalline polymer", *International Journal of Plasticity*, 49, 164-184.
- Guedes, R. M. 2011. "A viscoelastic model for a biomedical ultra-high molecular weight polyethylene using the time-temperature superposition principle", *Polymer testing*, 30(3), 294-302.
- Gueguen, O., Ahzi, S., Makradi, A., Belouettar, S. 2010, "A new three-phase model to estimate the effective elastic properties of semi-crystalline polymers: application to PET", *Mechanics of Materials*, 42(1), 1-10.
- Halloran, J. P., Petrella, A. J., Rullkoetter, P. J. 2005. "Explicit finite element modeling of total knee replacement mechanics", *Journal of biomechanics*, 38(2), 323-331.
- Havner, K. S. 2005. "On lattice and material-frame rotations and crystal hardening in high-symmetry axial loading", *Philosophical Magazine*, 85(25), 2861-2894.
- Heinrich, G., Straube, E., Helmig, G., 1988. "Rubber elasticity of polymer networks: theories". *Adv. Polym. Sci.* 85, 33-87.
- Hood R.W., T.M. Wright, and A.H. Burstein. 1983. "Retrieval analysis of total knee prostheses: A method and its application to 48 total condylar prostheses", *J Biomed Mater Res* 17:829-842.
- Hopkins, A. R., New, A. M., Rodriguez-y-Baena, F., Taylor, M. 2010. "Finite element analysis of unicompartamental knee arthroplasty", *Medical engineering physics*, 32(1), 14-21.
- Hsia, K. J., Xin, Y. B., Lin, L. 1994. "Numerical simulation of semi-crystalline nylon 6: elastic constants of crystalline and amorphous parts", *Journal of materials science*, 29(6), 1601-1611.
- Huan, Q., Zhu, S., Ma, Y., Zhang, J., Zhang, S., Feng, X., Han K., Yu, M. 2013. Markedly improving mechanical properties for isotactic polypropylene with large-size spherulites by pressure-induced flow processing. *Polymer*, 54(3), 1177-1183.
- Ingham, E., Fisher, J. 2000. "Biological reactions to wear debris in total joint replacement", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine*, 214(1), 21-37.
- Ingham, E., Fisher, J. 2000. "Biological reactions to wear debris in total joint replacement", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine*, 214(1), 21-37.
- James, A.G., Green, A., Simpson, G.M., 1975. "Strain energy functions of rubber. I. Characterization of gum vulcanizates". *J. Appl. Polym. Sci.* 19, 2033-2058.
- Katti, K. S. 2004. "Biomaterials in total joint replacement. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*", 39(3), 133-142.
- Kazmierczak, T., Galeski, A., Argon, A. S. 2005. "Plastic deformation of polyethylene crystals as a function of crystal thickness and compression rate", *Polymer*, 46(21), 8926-8936.
- Keller, A. 1957. "A note on single crystals in polymers: evidence for a folded chain configuration", *Philosophical Magazine*, 2(21), 1171-1175.

- Kovalchenko, A., Ajayi, O., Erdemir, A., Fenske, G., Etsion, I. 2005. "The effect of laser surface texturing on transitions in lubrication regimes during unidirectional sliding contact.", *Tribology International*, 38(3), 219-225.
- Kovalchenko, A., Ajayi, O., Erdemir, A., Fenske, G., Etsion, I. 2005. "The effect of laser surface texturing on transitions in lubrication regimes during unidirectional sliding contact.", *Tribology International*, 38(3), 219-225.
- Kuhn, W., 1934. "Über die Gestalt fadenförmiger Moleküle in Lösungen". *Kolloid-Z.* 68, 2–15
- Kurtz S.M., D.L. Bartel, and C.M. Rimnac. 1998. "Post-irradiation aging affects the stresses and strains in UHMWPE components for total joint replacement", *Clin Orthop* 350:209–220.
- Kurtz, S. M. 2004. "The UHMWPE handbook: ultra-high molecular weight polyethylene in total joint replacement". California, Academic Press.
- Kurtz, S. M. 2009. "UHMWPE biomaterials handbook: ultra high molecular weight polyethylene in total joint replacement and medical devices", Academic Press.
- Kustandi, T. S., Choo, J. H., Low, H. Y., Sinha, S. K. 2010. "Texturing of UHMWPE surface via NIL for low friction and wear properties", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(1), 015301.
- Lee, B. J., Ahzi, S., Asaro, R. J. 1995. "On the plasticity of low symmetry crystals lacking five independent slip systems", *Mechanics of materials*, 20(1), 1-8.
- Lee, B. J., Argon, A. S., Parks, D. M., Ahzi, S., Bartczak, Z. 1993. "Simulation of large strain plastic deformation and texture evolution in high density polyethylene", *Polymer*, 34(17), 3555-3575.
- Lee, B. J., Parks, D. M., Ahzi, S. 1993. "Micromechanical modeling of large plastic deformation and texture evolution in semi-crystalline polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(10), 1651-1687.
- Lee, B. J., Parks, D. M., Ahzi, S. 1993. "Micromechanical modeling of large plastic deformation and texture evolution in semi-crystalline polymers". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(10), 1651-1687.
- Lee, E.H., 1969. "Elastic-plastic deformation at finite strains". *Journal of Applied Mechanics: Transactions of the ASME* 36, 1–6.
- Li, D. S., Garmestani, H., Ahzi, S., Khaleel, M., Ruch, D. 2009. "Microstructure design to improve wear resistance in bioimplant UHMWPE materials", *Journal of Engineering Materials and Technology*, 131(4), 041211.
- Lin, L., Argon, A. S. 1994. "Rate mechanism of plasticity in the crystalline component of semicrystalline nylon 6", *Macromolecules*, 27(23), 6903-6914.
- Lin, L., Argon, A. S. 1994. "Structure and plastic deformation of polyethylene", *Journal of Materials Science*, 29(2), 294-323.
- López-Cervantes, A., Domínguez-López, I., Barceinas-Sánchez, J. D. O., García-García, A. L. 2013. "Effects of surface texturing on the performance of biocompatible UHMWPE as a bearing material during *in vitro* lubricated sliding/rolling motion", *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials*, 20, 45-53.

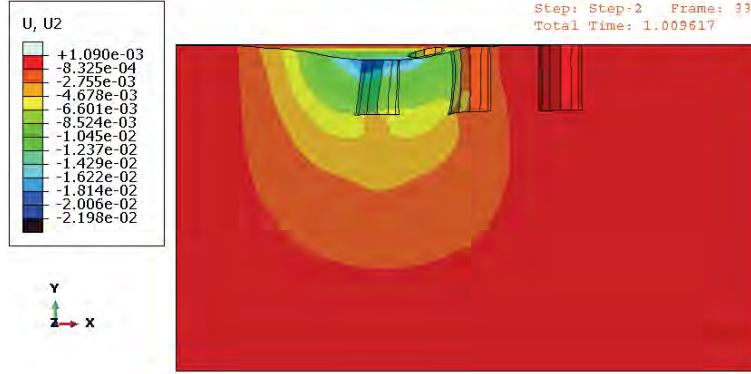
- Meine, K., Schneider, T., Spaltmann, D., Santner, E. 2002. "The influence of roughness on friction: Part I: The influence of a single step", *Wear*, 253(7), 725-732.
- Meine, K., Schneider, T., Spaltmann, D., Santner, E. 2002a. "The influence of roughness on friction: Part II. The influence of multiple steps", *Wear*, 253(7), 733-738.
- Miehe, C., Göktepe, S., Lulei, F. 2004. "A micro-macro approach to rubber-like materials—part I: the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(11), 2617-2660.
- Mura, T. 1987. "Micromechanics of Defects in Solids.", Martinus Nijhoff Publishers
- Museum of Healthcare at Kingston, "Hinged Knee Replacement", http://www.museumofhealthcare.ca/images/exhibits/kneedeign_03.gif, Son erişim tarihi: 28 Aralık 2014
- Nemat-Nasser S., Hori. M. 1999. "Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials", North Holland, Elsevier
- Nikolov, S., Doghri, I., Pierard, O., Zealouk, L., Goldberg, A. 2002. "Multi-scale constitutive modeling of the small deformations of semi-crystalline polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(11), 2275-2302.
- Nikolov, S., Lebensohn, R. A., Raabe, D. 2006. "Self-consistent modeling of large plastic deformation, texture and morphology evolution in semi-crystalline polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(7), 1350-1375.
- Oleinik, E. F. 2003. "Plasticity of semicrystalline flexible-chain polymers at the microscopic and mesoscopic levels", *Polymer science. Series C*, 45, 17-117.
- Parks, D. M., Ahzi, S. 1990. "Polycrystalline plastic deformation and texture evolution for crystals lacking five independent slip systems", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(5), 701-724.
- Peacock, A. 2000. "Handbook of polyethylene: structures: properties, and applications", CRC Press.
- Peterson, J. M. 1966. "Thermal initiation of screw dislocations in polymer crystal platelets", *Journal of Applied Physics*, 37(11), 4047-4050.
- Regis, M., Bracco, P., Giorgini, L., Fusi, S., Dalla Pria, P., Costa, L., Schmid, C. 2014. "Correlation between in vivo stresses and oxidation of UHMWPE in total hip arthroplasty", *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 25(9), 2185-2192.
- Rice, J. R. 1971. "Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 19(6), 433-455.
- Ripoll, M. R., Podgornik, B., Vižintin, J. 2011. "Finite element analysis of textured surfaces under reciprocating sliding", *Wear*, 271(5), 952-959.
- Sai, K., Laiarinandrasana, L., Naceur, I. B., Besson, J., Jeridi, M., Cailletaud, G. 2011. "Multi-mechanism damage-plasticity model for semi-crystalline polymer: Creep damage of notched specimen of PA6", *Materials Science and Engineering: A*, 528(3), 1087-1093.

- Sakurai, K., Nakajo, A., Takahashi, T., Takahashi, S., Kawazura, T., Mizoguchi, T. (1996). "Structure and mechanical properties of UHMWPE/EPT blends and their vulcanizates", *Polymer*, 37(17), 3953-3957.
- Sawano, H., Warisawa, S. I., Ishihara, S. 2009. "Study on long life of artificial joints by investigating optimal sliding surface geometry for improvement in wear resistance. *Precision engineering*", 33(4), 492-498.
- Shadrake, L. G., Guiu, F. 1976. "Dislocations in polyethylene crystals: line energies and deformation modes", *Philosophical Magazine*, 34(4), 565-581.
- Sobieraj, M. C., Rimmnac, C. M. 2009. "Ultra high molecular weight polyethylene: mechanics, morphology, and clinical behavior", *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials*, 2(5), 433-443.
- Taylor, G. I. 1938. "Plastic strain in metals" *J. Inst. Metals*, 62, 307–324.
- Thadani, P. J., Vince, K. G., Ortaaslan, S. G., Blackburn, D. C., Cudiamat, C. V. 2000. "Ten- to 12-year followup of the Insall-Burstein I total knee prosthesis", *Clinical orthopaedics and related research*, 380, 17-29.
- Treloar, L.R.G., 1944. "Stress–strain data for vulcanised rubber under various types of deformation". *Trans.Faraday Soc.* 40, 59–70.
- Treloar, L.R.G., 1975. "The Physics of Rubber Elasticity, 3rd Edition". Oxford, Clarendon Press.
- Uchida, M., Tokuda, T., Tada, N. 2010. "Finite element simulation of deformation behavior of semi-crystalline polymers with multi-spherulitic mesostructure", *International Journal of Mechanical Sciences*, 52(2), 158-167.
- Van Dommelen, J. V., Parks, D. M., Boyce, M. C., Brekelmans, W. A. M., Baaijens, F. P. T. 2003. "Micromechanical modeling of the elasto-viscoplastic behavior of semi-crystalline polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(3), 519-541.
- Van Dommelen, J. V., Parks, D. M., Boyce, M. C., Brekelmans, W. A. M., Baaijens, F. P. T. 2003. "Micromechanical modeling of the elasto-viscoplastic behavior of semi-crystalline polymers". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(3), 519-541.
- Wang, C., Zhao, Y., Song, J., Han, B., Wang, D. 2009. "Integrated polymer spherulites growing from one homogeneous nucleation site in supercritical fluid", *New Journal of Chemistry*, 33(9), 1841-1844.
- Wright, S. J., Nocedal, J. 1999. "Numerical optimization (Vol. 2)". New York: Springer.
- Yang, W., Chen, M. X. 2001. "Modeling of large plastic deformation in crystalline polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(11), 2719-2736.
- Young, R. J. 1974. "A dislocation model for yield in polyethylene", *Philosophical magazine*, 30(1), 85-94.
- Zeng, F., Le Grogneq, P., Lacrampe, M. F., Krawczak, P. 2010. "A constitutive model for semi-crystalline polymers at high temperature and finite plastic strain: Application to PA6 and PE biaxial stretching", *Mechanics of Materials*, 42(7), 686-697.
- Zhang, B., Huang, W., Wang, J., Wang, X. 2013. "Comparison of the effects of surface texture on the surfaces of steel and UHMWPE", *Tribology International*, 65, 138-145.

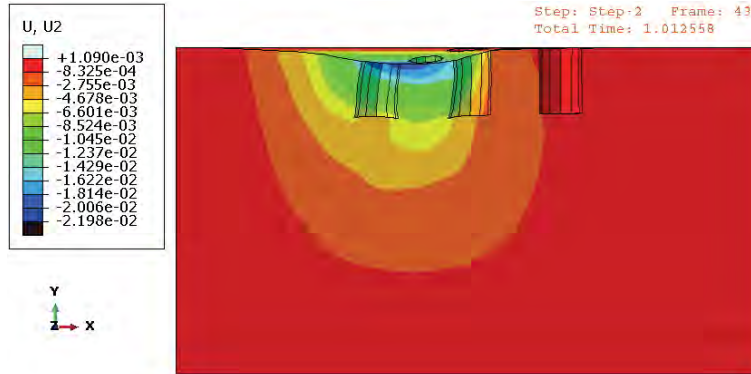
7. Ekler



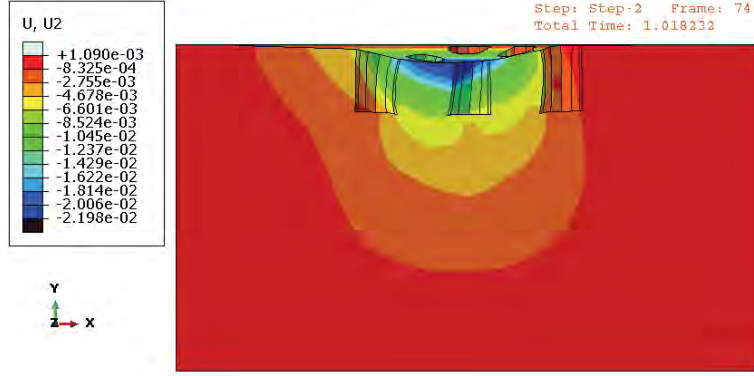
(a) Birinci çukurun başlangıcı



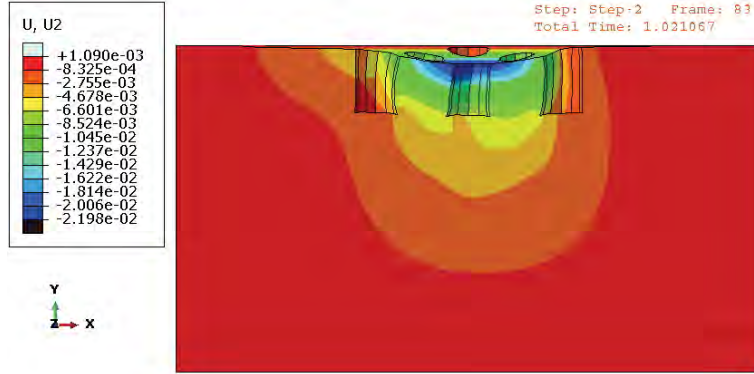
(b) Birinci çukurun ortası



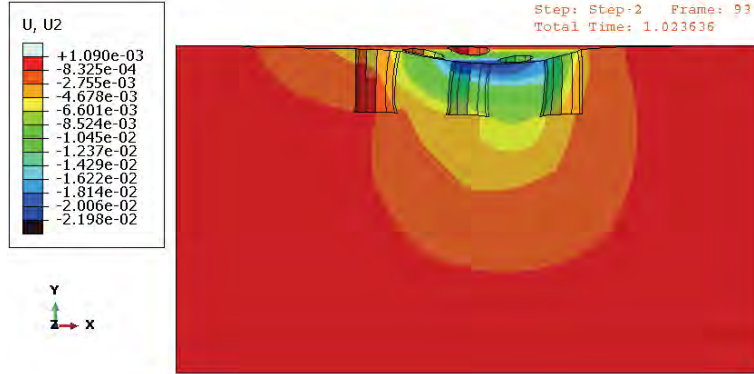
(c) Birinci çukurun sonu



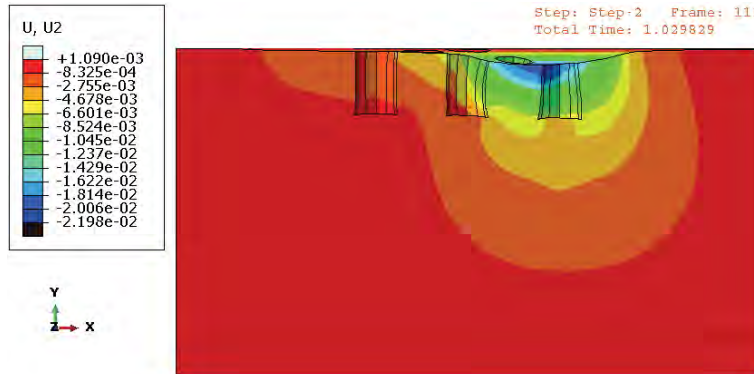
(d) İkinci çukurun başlangıcı



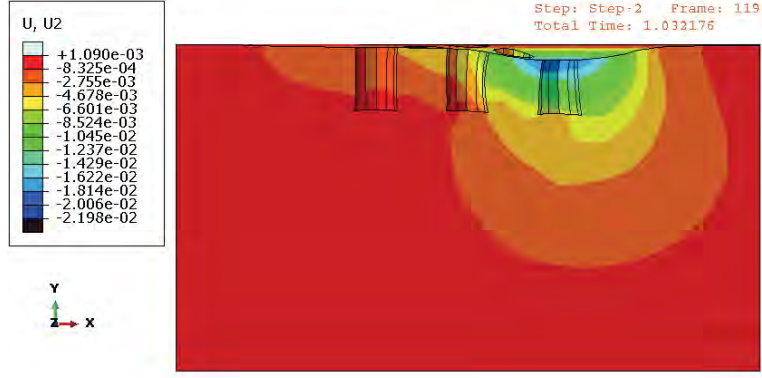
(e) İkinci çukurun ortası



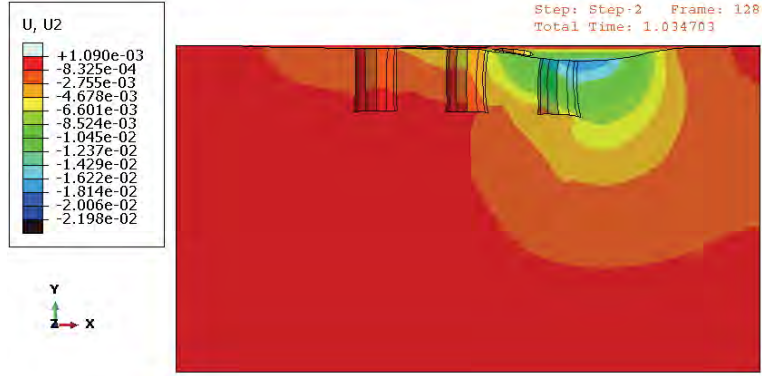
(f) İkinci çukurun sonu



(g) Üçüncü çukurun başlangıcı



(h) Üçüncü çukurun ortası



(i) Üçüncü çukurun sonu

Şekil 136. Kürenin merkezinin x-koordinatının, sürüklenme güzergahı boyunca çukurun belirli noktalarında bulunduğu durum için 3x3'lük desende 0.4 mm derinlikte çukurları bulunan UYMAPE parçanın şekil değiştirmiş ağında düşey deplasman bileşenlerinin dağılımı. Deformasyonlar 5 kat büyütülmüştür.

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Yrd. Doç. Dr. ERCAN GÜRSES
Proje No:	111M646
Proje Başlığı:	Ultra Yüksek Moleküler Ağırlıklı Polietilenin Çok Ölçekli Modellenmesi
Proje Türü:	3501 - Kariyer
Proje Süresi:	30
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	ORTA DOĞU TEKNİK Ü. MÜHENDİSLİK F. HAVACILIK VE UZAY MÜHENDİSLİĞİ B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/05/2012 - 01/11/2014
Onaylanan Bütçe:	164660.0
Harcanan Bütçe:	112360.26
Öz:	<p>Bu projenin temel amacı Ultra Yüksek Ağırlıklı Polietilen (UYMAPE) için geometrik olarak doğrusal olmayan, mikromekaniksel motivasyonlu ve çok ölçekli bir malzeme modeli geliştirmektir. Bu amaç doğrultusunda öncelikle UYMAPE'in amorf ve kristal fazlarındaki en önemli deformasyon mekanizmaları saptanacak ve bu saptamaların ışığında her iki faz için ayrı ayrı malzeme modelleri geliştirilecektir. Her bir faz için geliştirilen modellerde elastik ve elastik olmayan baskın deformasyon özellikleri göz önüne alınacak ve daha sonra iki fazlı yapıyı homojenleştirecek bir yöntem geliştirilecektir. Homojenleştirme yöntemini geliştirirken gerilim vektörünün sürekliliği ve kinematik uyumluluk gibi iki faz arasında gerçekleşen fiziksel etkileşim yasaları göz önüne alınacaktır. Homojenleştirme yöntemini geliştirdikten sonra, UYMAPE'lerin mevcut deneysel literatür verileri kullanılarak çok ölçekli modelin malzeme parametreleri tespit edilecektir. Bunu takiben, kalibre edilmiş çok ölçekli model diz eklem simülasyonu gibi karmaşık ve homojen olmayan sınır değer problemlerinin çözümü için bir sonlu elemanlar yazılım paketine entegre edilecektir. Son olarak, çok ölçekli malzeme modelini sonlu elemanlar metodu ile birlikte kullanarak daha uzun ömürlü yeni implantların tasarımı için bilgisayarlı benzetime dayalı bir modelleme aracı geliştirilecektir.</p>
Anahtar Kelimeler:	Çok ölçekli modelleme, yarı kristal polimerler, bünne denklemleri, sürtünme, ortopedik implant
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	<p>1- Yarı Kristal Polimer Malzemelerin Çok Ölçekli Modellenmesi (Bildiri - Ulusal Bildiri - Sözlü Sunum), 2- Modeling of Spherulite Microstructure in Semicrystalline Polymers (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 3- Microstructural Modeling of Semicrystalline Polymers (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 4- Modeling of Spherulite Microstructures in Semicrystalline Polymers (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum),</p>