

# بررسی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلیکریستال فلزی با استفاده از تئوری کریستال پلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی

محمد جعفری، مصطفی جمشیدیان<sup>\*</sup> و سعید ضیایی راد دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۰/۵۰/۱۳۹۶ – دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۷/۲۱)

چکیده – انرژی تغییر شکل ذخیره شده ناشی از نابجایی ها در داخل پلی کریستال های فلزی می تواند یک نیروی محرکه کافی برای حرکت مرز دانـه ها در طی عملیات حرارتی فراهم آورد. در این مقاله، ابتدا یک تئوری ساختاری کریستال ویسکوپلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی، سازگار با قوانین ترمودینامیک، برای تغییر شکل های بزرگ ارائه می شود تا بتواند توزیع انرژی ذخیره شده ناشی از تغییر شکل در مواد فلزی را با دقت قابل قبول پیش بینی کند. سپس معادلات ساختاری در نرمافزار آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل پیاده سازی می شوند. با انجام شبیه سازی های عددی روی تک کریستال های آلومینیوم و مقایسه نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی، تئوری ارائه شده مورد راستی آزمایی قرار گرفتـه و پارامترهای سخت شوندگی به دست می آیند. بهعنوان یک کاربرد از تئوری ساختاری توسعه داده شده، ار تباط میان توزیع انرژی ذخیره شدی و حرکت کرنش – القایی مرزدانه در پلی کریستال آلومینیوم در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل پیاده سازی عدی حرکت کرنش – القایی مرزدانه در پلی کریستال آلومینیوم در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای می توزیع انرژی ذخیره شده نشان می دهد که مدل تیلور دقت کانی برای محاسبه توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال و به دنبال آن حرکت مرز دانه ی ناشی از آن دنشان می دهد که مدل تیلور دقت کانی برای محاسبه توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال و به دنبال آن حرکت مرزدانه ناشـی از آن تغییر شکل در داخل ریز ساختار و نه مقادیر کلی آنها است.

واژههای کلیدی: انرژی ذخیره شده تغییر شکل، معادلات ساختاری، کریستال پلاستیسیته، اجزای محدود، مدل تیلور.

## Investigating the Stored Deformation Energy Distribution in a Polycrystalline Metal using a Dislocation Density-based Crystal Viscoplasticity Theory

M. Jafari, M. Jamshidian\* and S. Ziaei-Rad

Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran.

Abstract: The stored deformation energy in the dislocation structures in a polycrystalline metal can provide a sufficient

\* : مسئول مكاتبات، پست الكترونيكي: jamshidian@cc.iut.ac.ir

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

driving force to move grain boundaries during annealing. In this paper, a thermodynamically-consistent three-dimensional, finite-strain and dislocation density-based crystal viscoplasticity constitutive theory has been developed to describe the distribution of stored energy and dislocation density in a polycrystalline metal. The developed constitutive equations have been numerically implemented into the Abaqus finite element package via writing a user material subroutine. The simulations have been performed using both the simple Taylor model and the full micromechanical finite element model. The theory and its numerical implementation are then verified using the available data in literature regarding the physical experiments of the single crystal aluminum. As an application of the developed constitutive model, the relationship between the stored energy and the strain induced grain boundary migration in aluminum polycrystals has been investigated by the Taylor model and also, the full finite element model. The obtained numerical results indicated that the Taylor model could not precisely simulate the distribution of the stored deformation energy within the polycrystalline microstructure; consequently, the strain induced grain boundary migration. This is due to the fact that the strain induced grain boundary migration in a plastically deformed polycrystalline microstructure is principally dependent on the spatial distribution of the stored deformation energy rather than the overall stored energy value.

Keywords: Stored deformation energy, Constitutive equation, Crystal plasticity, Finite elements, Taylor model.

50	1		
b	بردار برگرز	s°α	بردار جهت لغزش $lpha$
С	تانسور مدول الاستيک	$\mathbf{S}^{\alpha}_{\cdot}$	lpha تانسور اشمید $lpha$
$\mathbf{E}^{e}$	تانسور كرنش الاستيك	Sα	مقاومت سيستم لغزش α
F	تانسور گرادیان تغییر شکل	Т	تانسور تنش كوشي
$\mathbf{F}^{\mathbf{p}}$	مؤلفه پلاستیک گرادیان تغییر شکل	Te	تانسور تنش الاستيك
F <sup>e</sup>	مؤلفه الاستيك گراديان تغيير شكل	α	سيستم لغزش
$\mathbf{h}^{lphaeta}$	ماتريس سختشوندگي	$\alpha_{th}$	ضريب انبساط حرارتي
J	دترمينان تانسور گراديان تغيير شكل	$\dot{\gamma}^{lpha}$	نرخ میکروبرش روی سیستم لغزش α
L	تانسور گرادیان سرعت	θ	دما
$\mathbf{K}_{\lambda}$	مدول انباشتگی نابجایی	μ	مدول برشی
Kτ	مدول بازیابی نابجایی	ρα	چگالی نابجایی مرتبط با سیستم لغزش α
$\mathbf{L}^{\mathbf{p}}$	تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک	$\tau^{\alpha}$	تنش برشی تجزیه شده
m	حساسيت نرخ كرنش	ψ	انرژی آزاد هلمهولتز
$\mathbf{m}^{\alpha}_{\cdot}$	بردار نرمال بر صفحه لغزش α	$\psi^e$	انرژی آزاد ترموالاستیک
Ν	تعداد کل سیستمهای لغزش	$\psi^p$	انرژی آزاد ترموپلاستیک

فهرست علائم

۱– مقدمه

طی تغییر شکل پلاستیک، بیشتر کار مکانیکی انجام شده به حرارت تبدیل می شود و مقدار اندکی انرژی در داخل ماده ذخیره می شود که سهم اساسی این مقدار انرژی ناشی از نابجایی های ذخیره شده در ماده بوده و عیب های نقطه ای<sup>۲</sup> در سطح میکرو سهم قابل توجهی در انرژی ذخیره شده نداشته و قابل صرف نظر کردن هستند. مکانیزم اصلی تغییر شکل پلاستیک مواد فلزی در سطح

میکرو، لغزش نابجایی هاست. نابجایی ها باعث ایجاد اعوجاج در شبکه کریستالی می شوند، لذا مقدار معینی انرژی الاستیک در ماده ذخیره می شود که همان انرژی ذخیره شده ناشی از تغییر شکل پلاستیک یا به اختصار انرژی ذخیره شده تغییر شکل<sup>۳</sup> است [۱].

در طول فرایند ترمومکانیکی، انرژی ذخیره شده در ریزساختار<sup>\*</sup> بهخاطر انباشتگی نابجاییها بـهعنـوان عامـل اصـلی بـرای حرکـت مرزدانه<sup>۵</sup>ها شناخته می شود. با توجه به اهمیت انـرژی ذخیـره شـده

۲

ناشی از کار مکانیکی در تغییر شکل ریزساختار، تحقیقات تجربی و تئوری زیادی در زمینه محاسبه مقدار انرژی ذخیره شده در یک فلز تغییر شکل یافته انجام شده است. بور و همکاران در سال ۱۹۷۱ در یک مقاله مروری، کلیه کارهای انجام شده در ایـن زمینـه را گردآوری کردند. آنها به این نتیجه رسیدند که حداکثر انرژی ذخیره شده در ریزساختار یک فلـز تغییـر شـکل یافتـه ۱۰ تـا ۱۵ درصد انرژی تغییر شکل است [۲]. رزاکیس و همکاران در سال ۲۰۰۰ با استفاده از قوانین ترمودینامیک رابطه ای یک بعدی برای نسبت کار پلاستیک تبدیل شده به حرارت ارائه دادند. آنها نتایج تحلیلی خود را با نتایج آزمایش مقایسه کرده و نشان دادند که ایـن نسبت برای بارگذاری های متفاوت با هم فرق دارد و وابسته به تاریخچه ماده است [۳]. بنزرگا و همکاران در سال ۲۰۰۵ انرژی ذخیره شده ناشی از کار سرد را برای تک کریستال <sup>۶</sup> تحت کشش با استفاده از مدل چگالی نابجایی بررسی کردند. آنها به بررسی اثرات جهات کریستالی، سطح کرنش و ساختار نابجایی روی انرژی ذخیره شده تغییر شکل پرداختند [۴]. آناند و همکاران در سال ۲۰۱۵ با استفاده از اصل توان مجاری و قوانین اول و دوم ترمودینامیک، یک تئوری گرادیان کرنش ترمومکانیکی بـرای رفتـار پلاستیک مستقل از نرخ تککریستال توسعه دادند. آنها با استفاده از این تئوری، روابطی را برای کسری از توان تـنش پلاسـتیک تبـدیل شده به حرارت و کاهش نابجایی ها طبی عملیات حرارتی ارائه كردند [۵]. با وجود اين، أنها فقط به ارائه روابط تئوري پرداختـه و الگوریتم عددی برای پیادهسازی روابط خود ارائه ندادند. مک بریـد و همکاران در سال ۲۰۱۵ به پیادهسازی عددی مدل آناند [۵] با روش اجزای محدود پرداخته و با کمک آن به شبیه سازی مسائل سهبعدی با تأکید بر نقش چگالی نابجایی پرداختند [۶]. با وجود این، یافته های آنها کیفی بود و به مقایسه نتایج خود با نتایج تجربی نپرداختند. بنابراین انتظار می رود یک مدل ساختاری پدیده شناسی با پارامترهای فیزیکی بتواند شبیه سازی واقعی از توزیع انـرژی ذخیـره شده در داخل ریزساختار ارائه داده و یک تطابق کمی مناسب میان نتایج شبیهسازی و آزمایشگاهی برقرار کند.

در دهه گذشته، مدل های کریستال پلاستیسیته<sup>۷</sup> به عنوان

ابزاری قوی برای ارائه رفتار مکانیکی از مواد فلزی مورد توجه محققان زیادی قرار گرفته است [۷ و ۸]. آنانـد و همکاران در سال ۲۰۰۴ یک تئوری پیوسته<sup>۸</sup> کلاسیک، تغییر شکل بـزرگ<sup>۹</sup> و سازگار با قوانین ترمودینامیک<sup>۱</sup> برای تک کریستال ها با رفتار الاسـتیک- ویسکوپلاسـتیک ارائـه داده و تغییـر شکل بـزرگ پلی کریستال<sup>۱۱</sup> مس را با روش اجزای محدود شبیهسازی کردنـد [۷]. گورتین و همکاران با درنظر گرفتن نابجاییهای ضروری هندسی<sup>۱۲</sup> یک ساختار پیوسته برای پلاستیسیته گرادیان کرنش ارائه دادند [۹]. مدل آنها بر مبنای سیسـتمی از تعادل نیروهای میکرو بود که از اصل توان مجازی که شامل تـرم های کرنش پلاستیک و گرادیان کرنش پلاستیک بود استخراج می شد. آنها با استفاده از مدلشان توانستند رفتارهای غیرکلاسیک مواد هماننـد اثرات اندازه در سطح میکرو را مدلسازی کنند.

مدل های کریستال پلاستیسیته همچنین به عنوان ابزاری قوی برای نمایش توزیع انرژی ذخیره شده در ریزساختار و به دنبال آن تغيير ريزساختار طي فرايندهاي ترمومكانيكي شـناخته مـيشـوند. پوپوا و همکاران تبلور مجدد دینامیکی در پلی کریستال منیزیم را با استفاده از مدل اجزای محدود بر مبنای کریستال پلاستیسیته ترکیب شده با مدل اتومات سلولی"، شبیه سازی کردند که در آن مکان های جوانه زنی بر مبنای توزیع غیرهمگن محلمی از چگالی نابجایی ها در عرض مرزدانه ها یا داخل دانه تعیین می شدند [۱۰]. استوجاکویچ و همکاران یک گام از نورد سبک روی ماده فولاد الكتريكي أهـن- سـيليكون را بـا اسـتفاده از مـدل كريسـتال پلاستیسیته کالیدیندی و همکاران [۱۱] شبیهسازی کردند [۱۲]. آنها مشاهده کردند که دانه هایی با جهت گیری فایبر لاندا<sup>۱۴</sup> که دارای فاکتور تیلور<sup>۱۵</sup> پایین تری نسبت به جهات دیگر هستند، دارای انرژی ذخیره شده تغییر شکل کمتری هستند. آنها همچنین با مقايسه نتايج خود با نتايج تجربي نتيجه گرفتند كه ايـن جهـات كريستالي طبي عمليات حرارتي بعد از نورد سبك، تقويت میشوند. با وجود این، آنها شبیهسازی دقیقی از توزیع انرژی ذخیره شده در داخل هر دانه انجام نداده و مدل کریستال يلاستيسيته مورد استفاده آنها وابسته به چگالی نابجایی نبود.

بنابراین هدف این مقاله، بررسی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در آغاز حرکت مرزدانه در مواد پلی کریستال فلزی است. در بخش دوم ابتدا یک مدل ساختاری تغییر شکل بزرگ سه بعدی، سازگار با قوانین ترمودینامیکی توسعه داده می شود که بتواند تغییرات چگالی نابجایی و انرژی ذخیره شده تغییر شکل در تک کریستالهای تحت بارگذاری ترمومکانیکی را به خوبی شرح دهد. در ادامه با پیادهسازی معادلات ساختاری در نرمافزار آباکوس<sup>۹۲</sup> از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT، توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال در دو حالت مدل تیلور<sup>۷۷</sup> و مدل اجزا محدود کامل<sup>۸۸</sup> مورد بررسی قرار می گیرد. همچنین، رابطه میان توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال و حرکت مرزدانه مورد بررسی قرار می گیرد.

۲- معادلات ساختاری

در این بخش، همه معادلات ساختاری و قوانین ترمودینامیک در هیئت مرجع توسعه داده می شوند و به عنوان نخستین فرض، نیروهای اینرسی و حجمی درنظر گرفته نمی شوند. علاوه بر این، تئوری ساختاری تحت شرایط همدما توسعه داده می شود و مقدار وجود این، وابستگی متغیرها به دما هنوز لحاظ می شوند چرا که شرایط هم دما می تواند در هر دمایی درنظر گرفته شود. بـمنظ ور ارائه مدل ساختاری تغییر شکل بزرگ برای شرح دادن تغییرات مکانیکی، تئوری ساختاری تغییر شکل کوچک آناند و همکاران کرنش آناند و همکاران، فقط نابجایی های ذخیره شده از لحاظ آماری درنظر گرفته می شوند. با ساده سازی تئوری گرادیان آماری درنظر گرفته می شوند. با با با به سازی تئوری گرادیان

**۲–۱– قانون دوم ترمودینامیک** شکل محلی قانون دوم ترمودینامیک در هیئت مرجع بهصـورت زیر بیان میشود:

 $JT: L \ge \psi$ (1) که متغیرهای  $\Psi$ ، T و L به تر تیب نشان دهنده انرژی آزاد هلمهولتز<sup>۹۱</sup> بر واحد حجم مرجع، تانسور تنش کوشی و تانسور گرادیان سرعت است و J = det(F) که F تانسور گرادیان تغییر شکل است. جمله L: TT بیان کننده توان تنش است که

در ادامه بر اساس بخش های الاستیک و پلاستیک بیان می شود.

#### ۲-۲- نظریه میکروسینماتیک

با پیروی از کارهای آناند و همکاران [۵] و آناند و لیله [۱۳]، تانسور گرادیان تغییر شکل بر اساس بخش های الاستیک و پلاستیک بهصورت زیر تجزیه میشود:

 $\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\mathbf{e}} \mathbf{F}^{\mathbf{p}} \tag{(1)}$ 

که  ${}^{\mathbf{p}}$  نشاندهنده بخش پلاستیک F به خاطر لغزش نابجایی ها و  ${}^{\mathbf{p}}$  بیانگر بخش الاستیک F به خاطر اتساع و چرخش شبکه کریستالی است. با توجه به اینکه عامل اصلی تغییر شکل پلاستیک حرکت نابجایی ها است، تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک  ${}^{\mathbf{r}}{}^{\mathbf{p}}{}^{\mathbf{p}}{}^{\mathbf{r}}=1$  وابسته به حرکت نابجایی ها می شود. فرض می شود که حرکت نابجایی ها روی سیستم های لغزش N,...,  $\mathbf{r}=\mathbf{n}$  در شبکه کریستالی اتفاق بیفتد که هر سیستم لغزش  $\mathbf{n}$  از یک بردار نرمال بر صفحه لغزش،  ${}^{\mathbf{n}}{}^{\mathbf{n}}$  و یک بردار جهت لغزش است. بنابراین تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک توسط نرخ های میکروبرش  ${}^{\mathbf{n}}{}^{\mathbf{r}}$  روی سیستم های لغزش  $\mathbf{n}$ , به مورت زیر تعریف می شود:

$$\mathbf{L}^{p} = \sum_{\alpha}^{N} \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha} \mathbf{s}^{\alpha}_{\circ} \otimes \mathbf{m}^{\alpha}_{\circ}$$
(\vec{v})

که تانسور مرتبه دوم °,S° = s° ⊗ m° بهعنوان تانسور اشمید<sup>۲۰</sup> شناخته میشود.

۲-۳- تانسور کرنش الاستیک و توان تنش
در مطالعه حاضر، تانسور کرنش الاستیک به فـرم زیـر تعریـف
میشود:

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

$$\mathbf{E}^{e} = \frac{1}{\gamma} (\mathbf{F}^{e^{\mathrm{T}}} \mathbf{F}^{e} - \mathbf{I})$$
 (4)

 $\mathbf{F}^{e}$  با استفاده از مشتق مادی تانسور کرنش الاستیک  $\mathbf{F}^{e}$ ،  $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}$  و تعریف تانسور تنش الاستیک به صورت  $\mathbf{F} = \mathbf{F}^{e}\mathbf{F}^{p}$ ،  $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}$  به صورت  $\mathbf{T}^{e} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{e^{-T}}\mathbf{T}\mathbf{F}^{e^{-T}}$  الاستیک و پلاستیک همانند زیر تجزیه می شود:

$$J\mathbf{T}: \mathbf{L} = \mathbf{T}^{e}: \dot{\mathbf{E}}^{e} + \sum_{\alpha=1}^{N} \tau^{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha}$$
 ( $\delta$ )

که جمله نخست از سمت راست معادله (۵) نشاندهنده توان تـنش الاستیک، و قسمت دوم نشاندهنده تـوان تـنش پلاسـتیک اسـت و تنش برشی تجزیه شده<sup>۲۱ م</sup> بهصورت زیر تعریف می شود:  $\tau^{\alpha} = \mathbf{C}^{\mathbf{e}}\mathbf{T}^{\mathbf{e}}$ ,  $\mathbf{C}^{\mathbf{e}} = \mathbf{F}^{\mathbf{e}^{\mathrm{T}}}\mathbf{F}^{\mathbf{e}}$  (۶)

که v<sup>e</sup> نشاندهنده انرژی آزاد ترموالاستیک است:

$$\psi^{e} = \frac{\gamma}{\gamma} [\mathbf{E}^{e} - (\theta - \theta_{\bullet})\alpha_{th}\mathbf{I}] : \mathbf{C} \frac{\gamma}{\gamma} [\mathbf{E}^{e} - (\theta - \theta_{\bullet})\alpha_{th}\mathbf{I}] \qquad (\Lambda)$$

پارامترهای .0, C و a<sub>th</sub> بهترتیب بیان کننده دمای مرجع، تانسور مدول الاستیک و ضریب انبساط حرارتی هستند. ۷<sup>P</sup> بیان کننده انرژی آزاد پلاستیک/عیوب است:

$$\psi^{\rm p} = a\mu b^{\rm r} \sum_{\alpha=\nu}^{\rm N} \rho^{\alpha} \tag{9}$$

که متغیرهای µ و b بهترتیب بیان کننده مدول برشی و قدر مطلق بردار برگرز<sup>۲۲</sup> بوده و پارامتر a یک ثابت بـهطور تقریبی برابر بـا ۵/۰ است. م<sup>α</sup> بـا n ...., N نشـاندهنده چگـالی نابجایی مرتبط با سیستم لغزش α است.

با توجه به اینکه تغییر شکل پلاستیک بـهعنـوان یـک تغییـر شکل دائمی بر اثر حرکت نابجـاییهـا ایجـاد مـیشـود، ایجـاد

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

نابجایی های جدید و اثر متقابل نابجایی ها با یکدیگر مکانیزم های اصلی سخت شوندگی در سطح میکرو هستند. معادلات مرتبط با تغییرات چگالی نابجایی بر اساس بخش تولید نابجایی ها و بخش کاهش نابجایی های مرتبط با عملیات حرارتی به دست می آیند. بنابراین در این مقاله، فرض می شود که نابجایی ها طبق رابطه ساختاری پدیدار شناسی <sup>۲۲</sup> زیر تغییر می کنند:

$$\dot{\rho}^{\alpha} = K_{1} \sqrt{\rho^{\alpha}} \left| \dot{\gamma}^{\alpha} \right| - K_{\gamma} \rho^{\alpha}, \qquad \rho_{t=*}^{\alpha} = \rho_{\cdot}^{\alpha} \qquad (1 \circ)$$

جمله نخست از سمت راست معادله (۸)، تولید نابجایی ها در طی تغییر شکل پلاستیک را نشان می دهد که  $\leq K_{n}$  نشان دهنده ضریب انباشتگی نابجایی ها است. جمله دوم از سمت راست بیانگر کاهش نابجایی ها بر اثر عملیات حرارتی است که  $\leq \gamma$  نشان دهنده نرخ بازیابی است.  $\rho$  نشان دهنده است که  $\leq \gamma$  نشان دهنده نرخ بازیابی است.  $\rho$  نشان دهنده پگالی نابجایی اولیه است. گفتنی است که در این معادله برای انباشتگی چگالی نابجایی، معمولاً یک حد اشباع درنظر گرفته می شود [۵]. با وجود این، چون موارد تحقیق شده در این مقاله همگی تحت کشش ساده حداکثر تا ۳۴ درصد کرنش هستند، فرض می شود که چگالی نابجایی کمتر از حد اشباع باشد.

با استفاده از قانون دوم ترمودینامیک، معادله سـاختاری زیـر برای تنش الاستیک بهدست میآید:

$$\mathbf{T}^{e} = \frac{\partial \psi^{e}}{\partial \mathbf{E}^{e}} = \mathbf{C}[\mathbf{E}^{e} - (\theta - \theta_{\bullet})\alpha_{th}\mathbf{I}]$$
(11)

که بهدنبال آن تانسور تنش کوشی بهصورت زیر از تانسور تنش الاستیک بهدست می آید:

$$\mathbf{T} = \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}^{\mathbf{e}} \mathbf{T}^{\mathbf{e}} \mathbf{F}^{\mathbf{e}^{-1}}$$
(17)

رابطه زیر به عنوان قانون جریان ویسکوپلاسـتیک بـرای ارتبـاط دادن نرخ میکرو برش <sup>α</sup>ن به <sup>π</sup> بـرای هـر سیسـتم لغـزش α استفاده میشود:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}^{\alpha}_{*} \left( \frac{\left| \tau^{\alpha} \right| - a\mu b^{\gamma} K_{\gamma} \sqrt{\rho^{\alpha}}}{S^{\alpha}} \right)^{\gamma/m} \operatorname{sign}(\tau^{\alpha})$$
(17)

	-	1
S. <sup>α</sup>	$m^{\alpha}_{\cdot}$	α
<u>\ \</u> •	111	١
1 • 1	111	۲
•1 <u>1</u>	111	٣
1 • 1	111	۴
110	111	۵
•1 <u>1</u>	111	۶
101	111	٧
• <del>\</del> \	111	٨
١١٠	111	٩
110	$\overline{1}$	١٠
١١٠	111	) )
<u>• 1 1</u>	$\overline{11}$	17

جدول ۱– سیستمهای لغزش استفاده شده برای شبیهسازی تککریستال آلومینیوم

توسط معادلات سختشوندگی زیر بهدست میآیند [۱۶]:

$$S^{\alpha} = \mu b \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N} h^{\alpha\beta} \rho^{\beta}}$$
(14)

که  $h^{lphaeta}$  ماتریس سخت شوندگی است.

در این مطالعه پارامترهای سخت شوندگی {م<sup>\(\alpha\)</sup>, m, K<sub>1</sub>, K<sub>7</sub>, γ<sup>\(\alpha\)</sup>} از طریق برازش نتایج شبیه سازی با نتایج تجربی به دست می آیند. معادلات ساختاری در نرمافزار آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT پیاده سازی می شوند.

### ٣- نتايج و بحث

در این بخش، از مدل ساختاری توسعه داده شده برای شبیه سازی نمونه های پلی کریستال آلومینیوم تحت بار گذاری مکانیکی استفاده می شود تا توزیع انرژی ذخیره شده در ریز ساختار بررسی شده و ارتباط آن با تغییرات ریز ساختار ناشی از اختلاف انرژی ذخیره شده در دو طرف مرزدانه مورد بحث قرار گیرد. برای این منظور، در ابتدا باید پارامترهای

سخت شوندگی مربوط به مـدل سـاختاری بـا اسـتفاده از نتـایج تجربی موجود برای تککریستالهای آلومینیوم کالیبره شوند.

۳–۱– شبیهسازی تککریستال آلومینیوم

از نتایج تجربی هاسفورد و همکاران [۱۷] روی تک کریستال های آلومینیوم <۱۱۱ و <۱۰۰ برای کالیبره کردن مدل کریستال پلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی ارائه شده استفاده می شود. پارامترهای سخت شوندگی از طریق برازش نتایج شبیه سازی با منحنی های تنش – کرنش تجربی به دست می آیند. برای شبیه سازی تک کریستال ها از مکعب ساده با المان های آجری پیوسته سه بعدی هشت گره ای استفاده شده است. تغییر شکل به صورت جابه جایی با نرخ کرنش ثابت <sup>1</sup> - ۳<sup>-</sup> ۱×۷/۱ در دمای ۲۷۳ درجه کلوین به نمونه اعمال می شود. برای اعمال نرخ کرنش ثابت در حین بارگذاری از زیربرنامه UAMP در نرمافزار آباکوس استفاده می شود. جدول (۱) سیستم های لغزش استفاده شده برای شبیه سازی ماده آلومینیوم را نشان می دهد.

DOR: 20.1001.1.22287698.1397.37.2.5.1 ]

Downloaded from iutjournals.iut.ac.ir on 2024-05-19

$C_{11} = 1 \circ \wedge GPa$	ثابتهاي الاستيك	
$C_{17} = 91/ \pi \text{GPa}$		
$C_{\gamma\gamma} = \gamma \wedge / \Delta GPa$		
$\mu = r \delta GPa$		
b = r / A rm	بردار برگرز	
$m = \circ / \circ \iota \iota$	قانون جريان	
$\dot{\gamma}^{\alpha}_{\circ} = \circ / \circ \circ 1. \alpha = 11$		
$K_{\gamma} = \gamma \Delta \circ \mu m^{-\gamma}$	پارامترهای سختشوندگی	
$K_{\gamma} = \circ / \circ 1 s^{-1}$		
$\rho_{\star}^{\alpha} = \circ / \circ 1  \mu m^{-7} \cdot \alpha = 1 \dots 17$	چگالی نابجایی اولیه	

جدول ۲- پارامترهای مادی استفاده شده برای شبیهسازی تک کریستال آلومینیوم



شکل ۱- منحنی تنش- کرنش تککریستالهای آلومینیوم <۱۱۱> و <۱۰۰> برازش شده با نتایج تجربی هاسفورد و همکاران [۱۷]

جدول (۲) ثابت های مادی استخراج شده از مراجع و پارامترهای مادی کالیبره شده برای شبیه سازی تک کریستال ها را نشان می دهد. پارامترهای نرخ برشی مرجع، <sup>α</sup>, و حساسیت نرخ کرنش، m همان طور که در جدول (۲) نشان داده شده است از کار کالیدیندی و همکاران استخراج شده اند [۱۱]. شکل (۱) مقایسه میان نتایج تجربی هاسفورد و همکاران [۱۷] و منحنی های تنش – کرنش تک کریستال های آلومینیوم به دست

آمده از شبیه سازی با استفاده از پارامترهای مادی ارائه شده در جدول (۲) را نشان می دهد. همان طور که این شکل نشان می دهد، تطابق خوبی بین نتایج تجربی با نتایج به دست آمده از طریق شبیه سازی وجود دارد و اینکه مدل ارائه شده، تفاوت در سخت شوندگی بین تککریستال های <۱۱۱ و <۱۰۰ را به خوبی مدل سازی می کند. مطابق شکل (۱)، نرخ سخت شوندگی در تک کریستال <۱۱۱ سریع تر از تک کریستال <۱۰۰ است

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷



شکل ۲– تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل برحسب کرنش برای تککریستالهای آلومینیوم

جدول (۲) برای شـبیهسـازی نمونـه پلـیکریسـتال آلومینیـومی استفاده میشود.

#### ۲-۳- شبیهسازی پلی کریستال آلومینیوم

به عنوان یک کاربرد از تئوری ساختاری کریستال پلاستیسیته برای محاسبات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر دانه از مواد پلی کریستالی، در این بخش پدیده حرکت مرزدانه کرنش – القایی<sup>۲۴</sup> یا SIBM بررسی می شود. پدیده حرکت مرزدانه کرنش – القایی شامل برآمده شدن بخشی از یک مرز است که از قبل موجود بوده و منطقه ای با مقدار نابجایی کمتر را پس از مهاجرت مرز برجا می گذارد [۱]. نیروی محرک لازم جهت SIBM معمولاً بر اثر تفاوت مقدار انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دو طرف مرزدانه ایجاد می شود [۱]. بنابراین در این بخش تمرکز روی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل مورد بررسی قرار می گیرد تا مشخص شود که کدام یک از این دو مدل می توانند تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل و درنتیجه حرکت مرزدانه کرنش – القایی را

تغییرات انرژی ذخیرہ شدہ تغییر شکل برای هر یک از تک کریستال ها در شکل (۲) نشان داده شده است. انرژی ذخیره شده تغییر شکل از رابطـه محاسـبه محاسـبه مـیشـود. بـهصورت خلاصـه، در ابتـدا جمع چگـالي نابجـاييهـا روي سیستمهای لغزش،  $\sum_{i=1}^{N} \rho^{lpha}$  برای هر یک از نقاط انتگرالگیـری محاسبه شده و سپس انرژی ذخیره شده تغییر شکل از رابطه بالا محاسبه می شود. درنهایت، مقادیر انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مقیاس ماکرو که میانگین حجمی از انرژی های ذخیره شده تغيير شكل محلي در كل مدل هستند، محاسبه ميشوند. همان طور که از شکل (۲) نمایان است، تفاوت در تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل موجب تفاوت در نرخهای سخت شوندگی میان دو نوع تک کریستال می شود. مطابق شکل (٢)، تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل به شدت وابسته به جهت گیری کریستال ها بوده که هر کریستال با جهت منحصر بەفرد دارای انرژی ذخیرہ شدہ تغییر شکل معینے است کے با کریستال های دیگر متفاوت است.

در بخش بعدی، از مدل ارائه شده با پارامترهای موجـود در

روشهای عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

DOI: 10.29252/jcme.37.2.1 ]



شکل ۳– الف) مدل اجزای محدود اولیه از ریزساختار شبیهسازی شده که هر رنگ نشاندهنده یک دانه با جهت کریستالی مجزا است، ب) شبکه اجزا محدود اولیه برای شبیهسازی پلیکریستال آلومینیوم (رنگی در نسخه الکترونیکی)

دقيق تر محاسبه كنند.

حجمک نماینده ۲۵ استفاده شده برای شبیهسازی پلی کریستال آلومینیوم برای مدل اجزای محدود کامل در شکل (۳- الف) نشان داده شده است. این حجمک نماینده که دارای ۶۴ دانه است، با روش سنگفرش ورونی<sup>۴۶</sup> ساخته شـد کـه توضـیحات دقیقتر در مورد روش ساخت این مدل در مراجع [۱۸] موجـود است. به هر یک از دانه های این حجمک نماینده یک جهت گیری کریستالی اتفاقی تخصیص داده می شود که وجود رنگهای متمایز برای هر یک از دانههای موجود در شکل (۳-الف) بیانگر آن است. شکل (۳- ب) شبکه اجزای محدود اولیه استفاده شده برای شبیهسازی پلی کریستال را نشان می دهد که شامل ۲۰۴۲ المان مربعی کرنش صفحهای چهار گرهای است. قابل ذکر است که استقلال نتایج از تعداد المان ها برای این مدل مورد بررسی قرار گرفته است. برای اعمال کشش ساده روی نمونه، کشش روی سطح بالایی به صورت جابه جایی با نرخ کرنش ثابت <sup>s-1</sup> -<sup>m</sup>s<sup>-1</sup> در دمای ۲۷۳ درجه کلوین اعمال می شود. برای اعمال نرخ کرنش ثابت در حین بارگذاری از زيربرنامه UAMP استفاده می شود.

نتایج شبیه سازی برای توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل ریز ساختار در شکل (۴) نشان داده شده است. همان طور که از این شکل مشخص است انرژی ذخیره شده در داخل هر دانه به خاطر جهت گیری منحصر به فرد آن، با دانه های دیگر متفاوت است. زیرا همان طور که قبل از این گفته شد هر دانه دارای ظرفیت انرژی ذخیره شده تغییر شکل معینی است.

برای شبیه سازی پلی کریستال آلومینیوم با فرض مدل تیلور، یک مربع با یک المان مربعی کرنش صفحهای چهار گرهای درنظر گرفته می شود و به نقطه انتگرال گیری آن ۶۴ دانه اختصاص داده می شود که جهتهای کریستالی تخصیص داده شده به دانه ها به طور دقیق مشابه با حالت مدل ورونی است. کشش ساده روی این نقطه انتگرال گیری به صورت جابه جایی با نرخ کرنش ثابت <sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> در دمای ۲۷۳ درجه کلوین اعمال می شود.

تغییرات تنش برحسب کرنش برای هر دو مدل تیلور و ورونی در شکل (۵) نشان داده شده است. همان طور که از این شکل مشخص است منحنی تنش برحسب کرنش در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل تقریباً یکسان است و هر دو مدل رفتار یکسانی را نشان میدهند. تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷



شکل ۴- نتایج شبیهسازی برای توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در ریزساختار (رنگی در نسخه الکترونیکی)



شکل ۵– مقایسه میان منحنی تنش– کرنش بهدست آمده از طریق شبیهسازی در مقیاس ماکرو برای مدل تیلور و مدل ورونی

برای بررسی انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر یک از دانه ها، دو جفت دانه مجاور هم در دو ناحیه متفاوت از مدل ورونی انتخاب می شوند. این دو جفت دانه مجاور در شکل (۳- الف) یکی با حروف A-B و دیگری با حروف C-D مشخص شده اند. روند تغییرات میانگین حجمی انرژی ذخیره شده تغییر شکل با کرنش برای هر یک از جفت دانه های مجاور م-B-A و C-D به ترتیب در شکل های (۷- الف) و (۸- الف) نشان داده شده است. همان طور که از این شکل ها نمایان است، شکل برحسب کرنش در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل نیز در شکل (۶) نشان داده شده است. این شکل نیز نشان می دهد که انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل یکسان است. در ادامه برای بررسی دقیق تر رفتار هر یک از دو مدل ورونی و تیلور در بعد میکرو، به بررسی انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر یک از دانه ها پرداخته می شود و ارتباط آن با حرکت مرزدانه از طریق بررسی تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دو طرف مرزدانه مورد بررسی قرار می گیرد.

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

DOI: 10.29252/jcme.37.2.1 ]



شکل ۶– مقایسه میان منحنی انرژی ذخیره شده تغییر شکل بهدست آمده از شبیهسازی در مقیاس ماکرو از طریق مدل تیلور و مدل ورونی

هر دو مدل روند تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر یک از دانه ها را به خوبی مدل می کنند. به عنوان مثال انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل دانه A برای هر دو مدل ورونی و تیلور بیشتر از دانه B است و حتی شیب افزایشی منحنی های به دست آمده از دو مدل به طور تقریبی یکسان است. این نتایج برای بررسی تغییرات ریز ساختار در طول عملیات حرارتی روشنگر است زیرا تفاوت بین انرژی های ذخیره شده در دانه های مجاور باعث حرکت مرزدانه از طریق SIBM می شود. هر دو مدل بیان می کنند که بعد از اعمال تغییر شکل و قرار گرفتن پلی کریستال در دمای می برند زیرا مطابق اصول ترمودینامیک، حرکت مرزدانه در جهتی است که منجر به کاهش انرژی ذخیره شده تغییر شکل در ماده شود.

در مرحله رشد، اگر فشار ترمودینامیکی خالص وارد بر مرزدانه برابر با P باشد، مرزدانه با سرعت V=MP حرکت میکند که در این رابطه M ضریب تحرک<sup>۷۷</sup> مرزدانه است. به طور کلی فرض می شود که سرعت مرزدانه رابطه خطی با فشار خالص وارد بر آن از طریق ثابت M دارد [۱]. در مطالعه حاضر، با توجه به اینکه نیروی محرک وارد بر مرزدانه C-D نسبت بیشتر از مرزدانه A-B است، SIBM در مرزدانه C-D نسبت

به مرزدانه A-B با سرعت بالاتری رخ می دهد. بنابراین، از نتایج فوق واضح است که توزیع انرژی ذخیره شده از طریق ایجاد نیروی محرک ترمودینامیکی، SIBM را تحت تأثیر قرار می دهد.

طبق مطالعات تجربی انجام شده، تغییرات ریزساختار در طول عمليات حرارتي براي فلز كار سرد شده نه تنها وابسته به انرژی ذخیره شده است بلکه به طور ویژهای وابسته به توزیع آن در داخل ریزساختار است [۱]. برای بررسی جزئی تر تفاوت انرژی ذخیره شده میان دانه های مجاور، روی المان های مجاور دو طرف مرزدانه های A-B و C-D از ریزساختار شکل (۳- ب) که در شکل (۹) به صورت برجسته نشان داده شده است متمركز مى شويم. روند تغييرات تفاوت انرژى ذخيره شده میان دانه های مجاور A-B و C-D و المان های مجاور برجسته شده آنها، بهترتیب در شکل های (۷- ب) و (۸- ب) نشان داده شده است. واضح است که نیروی محرک وارد بر مرزدانهها ناشی از تفاوت انرژی ذخیره شده در داخل دانههای مجاور برای هر دو مدل متفاوت است. به عنوان نمونه شکل (۷- ب) نشان می دهد که در مرحله رشد، نرخ SIBM بین دو دانه مجاور A-B برای مدل ورونی بزرگتر از مدل تیلور است. از طرفی، از این شکل مشخص است که تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل و روند تغییرات آن برای المان های مجاور



شکل ۷- الف) روند تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دانههای مشخص شده A و B در شکل (۳- الف)، ب) روند تغییرات تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل میان دانههای A و B و المانهای مجاور مرزدانه نشان داده شده در شکل (۹)

کرنش – القایی مرزدانه را شبیه سازی کند. برای شبیه سازی دقیق حرکت کرنش – القایی مرزدانه نیاز است تا مدل سازی به صورت اجزای محدود کامل انجام گیرد. این نتایج همچنین از شکل (۸- ب) که تفاوت انرژی ذخیره شده بین دو دانه مجاور C و D را نشان می دهد، قابل برداشت است. به عبارت دیگر، حرکت کرنش – القایی مرزدانه در یک ریز ساختار پلی کریستال تحت تغییر شکل پلاستیک، به شدت وابسته به توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل ریز ساختار و نه مقادیر حجمی میانگین آنها است. مختلف با میانگین حجمی به دست آمده از طریق مدل تیلور و مدل ورونی متفاوت است. به عنوان مثال با افزایش کرنش، نیروی محرک مورد نیاز برای SIBM بین کل المان های مجاور دانه های A و B همانند A1-B1 و A2-B2 در ابتدا افزایش و سپس کاهش می یابد درصورتی که نیروی محرک مورد نیاز برای SIBM بر اساس میانگین حجمی بین دانه های مجاور همواره با کرنش افزایش می یابد. با توجه به اینکه مطابق شواهد تجربی، توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مجاورت مرزدانه ها بر نرخ SIBM تأثیر ویژه ای دارد، این شکل نشان می دهد که مدل تیلور نمی تواند به خوبی حرکت

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

DOI: 10.29252/jcme.37.2.1 ]



شکل ۸- الف) روند تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دانههای مشخص شده C و D در شکل (۳- الف)، ب) روند تغییرات تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل میان دانههای C و D و المانهای مجاور مرزدانه نشان داده شده در شکل (۹)



شکل ۹- دانههای مشخص شده در شکل (۳– الف) همراه با المانهای مشخص شده در دو طرف مرزدانه میان: الف) دانههای مجاور A و B، ب) دانههای مجاور C و D

روش های عددی در مهندسی، سال ۳۷، شمارهٔ ۲، زمستان ۱۳۹۷

واژەنامە

مراجع

در این مقاله، یک تئوری ساختاری کریستال پلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی، تغییر شکل بزرگ، سه بعدی، سازگار با قوانین ترمودینامیک برای بیان توزیع انرژی کرنشی و نابجاییهای ذخیره شده در داخل ریزساختار یک فلز پلی کریستالی ارائه شد. سپس، این معادلات ساختاری در نرم افزار اجزای محدود آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT پیادهسازی شدند. بهطور خلاصه نتایج زیر از شبیهسازیهای عددی بهدست آمدند:

۲ منتخلی های نشق گرنش از محکوریستان های الومینیوم ب دقــت قابــل قبــولی شــبیهســازی شــدند و تفــاوت رفتــار

- 1. dislocation
- 2. point defects
- 3. stored deformation energy
- 4. microstructure
- grain boundary
   single crystal
- 7. crystal plasticity
- 8. continuum
- 9. finite deformation
- 10. thermodynamically consistent

- 11. polycrystalline
- 12. geometrically necessary dislocation
- 13. cellular automaton
- 14. launda fiber
- 15. Taylor factor
- 16. Abaqus

قابل قبولى مدلسازى شد.

- 17. Tayor model
- 18. full finite element model
- 19. Helmhotz free energy
- 20. Schmid tensor

- 21. resolved shear stress
- 22. Burgers vector
- 23. phenomenological
- 24. strain induced grain boundary migration (SIBM)
- 25. representative volume element
- 26. Voronoi-Tesselation Method
- 27. mobility

1. Humphreys, M., and Hatherly, F., *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Second Edition, Elsevier, 2004.

سخت شوندگی تک کریستال های <۰۰ ا> و <۱۱۱ با دقت

۲- برای بررسی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل

دانه ها و ارتباط آن با تغییرات ریزساختار از طریق حرکت

كرنش القايي مرزدانه، نمونه هاي يلي كريستال آلومينيوم تحت

کشش در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل

شبیهسازی شدند. نتایج شبیهسازی نشان داد کـه مـدل اجـزای

محدود كامل نسبت به مدل تيلور، توزيع انرژي ذخيره شده

تغییر شکل در داخل دانه را بهتر مدلسازی میکند؛ بنابراین

قادر است حرکت مرزدانه در طی فرایند عملیات حرارتی بعد از

تغيير شكل را بهگونهاي دقيق تر پيش بيني كند.

- Bever, M., Holt, D., and Titchener, A., "The Stored Energy of Cold Work", *Progress in Materials Science*, Vol. 17, pp. 5-177, 1973.
- Rosakis, P., Rosakis, A., Ravichandran, G., and Hodowany, J., "A Thermodynamic Internal Variable Model for the Partition of Plastic Work into Heat and Stored Energy in Metals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, pp. 581-607, 2000.
- Benzerga, A., Brechet, Y., Needleman, A., and derGiessen, E. V., "The Stored Energy of Cold Work: Predictions from Discrete Dislocation Plasticity", *Acta Materialia*, Vol. 53, pp. 4765-4779, 2005.
- 5. Anand, L., Gurtin, M. E., and Reddy, B. D., "The Stored Energy of Cold Work, Thermal Annealing, and other Thermodynamic Issues in Single Crystal

Plasticity at Small Length Scales", International Journal of Plasticity, Vol. 64, pp. 1-25, 2015.

- McBride, A., Bargmann, S., and Reddy, B., "A Computational Investigation of a Model of Singlecrystal Gradient Thermoplasticity that Accounts for the Stored Energy of Cold Work and Thermal Annealing", *Computational Mechanics*, Vol. 55, pp. 755-769, 2015.
- Anand, L., "Single-crystal Elasto-viscoplasticity: Application to Texture Evolution in Polycrystalline Metals at Large Strains", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, pp. 5359-5383, 2004.
- Jafari, M., Jamshidian, M., and Ziaei-Rad, S., "A Finite-deformation Dislocation Density-based Crystal Viscoplasticity Constitutive Model for Calculating the Stored Deformation Energy", *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 128-129, pp. 486-498, 2017.

- Gurtin, M. E., "A Finite-deformation, Gradient Theory of Single-crystal Plasticity with Free Energy Dependent on the Accumulation of Geometrically Necessary Dislocations", *International Journal of Plasticity*, Vol. 26, pp. 1073-1096, 2010.
- Popova, E., Staraselski, Y., Brahme, A., Mishra, R., and Inal, K., "Coupled Crystal Plasticity Probabilistic Cellular Automata Approach to Model Dynamic Recrystallization in Magnesium Alloys", *International Journal of Plasticity*, Vol. 66, pp. 85-102, 2015.
- Kalidindi, S., Bronkhorst, C. A., and Anand, L., "Crystallographic Texture Evolution in Bulk Deformation Processing of FCC Metals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 40, pp. 537-569, 1992.
- 12. Stojakovic, D., Doherty, R., Kalidindi, S., and Landgraf Fernando J. G., "Thermomechanical Processing for Recovery of Desired (001) Fiber Texture in Electric Motor Steels", *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 39, pp. 1738-1746, 2008.
- 13. Lele, S. P., and Anand, L., "A Large-deformation Strain-Gradient Theory for Isotropic Viscoplastic

Materials", *International Journal of Plasticity*, Vol. 25, pp. 420-453, 2009.

- Fried, E., and Gurtin, M. E., "Dynamic Solid-solid Transitions with Phase Characterized by an Order Parameter", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 72, pp. 287-308, 1994.
- Gurtin, M. E., Anand, L., and Lele, S. P., "Gradient Single-crystal Plasticity with Free Energy Dependent on Dislocation Densities", *Journal of the Mechanics* and Physics of Solids, Vol. 55, pp. 1853-1878, 2007.
- Lee, M., Lim, H., Adams, B., Hirth, J., and Wagoner, R., "A Dislocation Density-based Single Crystal Constitutive Equation", *International Journal of Plasticity*, Vol. 26, pp. 925-938, 2010.
- 17. Hosford, W., Fleischer, R., and Backofen, W., "Tensile Deformation of Aluminum Single Crystals at Low Temperatures", *Acta Materialia*, Vol. 8, pp. 187-199, 1960.
- Nouri, N., Ziaei-Rad, V., and Ziaei-Rad, S., "An Approach for Simulating Microstructures of Polycrystalline Materials", *Computational Mechanics*, Vol. 52, pp. 181-192, 2012.