

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

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

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۵/۰۱ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۷/۲۱)

**چکیده** - انرژی تغییر شکل ذخیره شده ناشی از نابجایی‌ها در داخل پلی کریستال‌های فلزی می‌تواند یک نیروی محرکه کافی برای حرکت مرز دانه‌ها 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 شکل‌های بزرگ ارائه می‌شود تا بتواند توزیع انرژی ذخیره شده ناشی از تغییر شکل در مواد فلزی را با دقت قابل قبول پیش‌بینی کند. سپس معادلات ساختاری در نرم‌افزار آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل پیاده‌سازی می‌شوند. با انجام شبیه‌سازی‌های عددی روی تک کریستال‌های آلومینیوم و مقایسه نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی، تئوری ارائه شده مورد راستی‌آزمایی قرار گرفته و پارامترهای سخت‌شوندگی به دست می‌آیند. به عنوان یک کاربرد از تئوری ساختاری توسعه داده شده، ارتباط میان توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل و حرکت کرنش - القایی مرزدانه در پلی کریستال آلومینیوم در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل بررسی می‌شود. نتایج شبیه‌سازی عددی نشان می‌دهد که مدل تیلور دقت کافی برای محاسبه توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال و به دنبال آن حرکت مرزدانه ناشی از آن را ندارد، چرا که حرکت کرنش - القایی مرزدانه در یک ریزساختار پلی کریستالی تحت تغییر شکل پلاستیک به شدت وابسته به توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل ریزساختار 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 مکاتبات، پست الکترونیکی: jamshidian@cc.iut.ac.ir

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.

## فهرست علائم

$s_{\alpha}^{\alpha}$	بردار جهت لغزش $\alpha$	b	بردار برگرز
$S_{\alpha}^{\alpha}$	تانسور اشמיד $\alpha$	C	تانسور مدول الاستیک
$S^{\alpha}$	مقاومت سیستم لغزش $\alpha$	$E^e$	تانسور کرنش الاستیک
T	تانسور تنش کوشی	F	تانسور گرادیان تغییر شکل
$T^e$	تانسور تنش الاستیک	$F^p$	مؤلفه پلاستیک گرادیان تغییر شکل
$\alpha$	سیستم لغزش	$F^e$	مؤلفه الاستیک گرادیان تغییر شکل
$\alpha_{th}$	ضریب انبساط حرارتی	$h^{\alpha\beta}$	ماتریس سخت‌شوندگی
$\dot{\gamma}^{\alpha}$	نرخ میکروبرش روی سیستم لغزش $\alpha$	J	دترمینان تانسور گرادیان تغییر شکل
$\theta$	دما	L	تانسور گرادیان سرعت
$\mu$	مدول برشی	$K_1$	مدول انباشتگی نابجایی
$\rho^{\alpha}$	چگالی نابجایی مرتبط با سیستم لغزش $\alpha$	$K_2$	مدول بازیابی نابجایی
$\tau^{\alpha}$	تنش برشی تجزیه شده	LP	تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک
$\psi$	انرژی آزاد هلمهولتز	m	حساسیت نرخ کرنش
$\psi^e$	انرژی آزاد ترموالاستیک	$m_{\alpha}^{\alpha}$	بردار نرمال بر صفحه لغزش $\alpha$
$\psi^p$	انرژی آزاد ترموپلاستیک	N	تعداد کل سیستم‌های لغزش

## ۱- مقدمه

میکرو، لغزش نابجایی هاست. نابجایی‌ها باعث ایجاد اعوجاج در شبکه کریستالی می‌شوند، لذا مقدار معینی انرژی الاستیک در ماده ذخیره می‌شود 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>۴</sup> به‌خاطر انباشتگی نابجایی‌ها به‌عنوان عامل اصلی برای حرکت مرزخانه<sup>۵</sup>ها شناخته می‌شود. با توجه به اهمیت انرژی ذخیره شده

طی تغییر شکل پلاستیک، بیشتر کار مکانیکی انجام شده به حرارت تبدیل می‌شود و مقدار اندکی انرژی در داخل ماده ذخیره می‌شود که سهم اساسی این مقدار انرژی ناشی از نابجایی<sup>۱</sup>های ذخیره شده در ماده بوده و عیب‌های نقطه‌ای<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

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 این زمینه را گردآوری کردند. آنها به این نتیجه رسیدند که حداکثر انرژی ذخیره شده در ریزساختار یک فلز تغییر شکل یافته ۱۰ تا ۱۵ درصد انرژی تغییر شکل است [۲]. زاکیس 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 این نسبت برای بارگذاری های متفاوت با هم فرق دارد و وابسته به تاریخچه ماده است [۳]. بزرگا 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 مجازی و قوانین اول و دوم ترمودینامیک، یک تئوری گرادیان کرنش ترمومکانیکی برای رفتار پلاستیک مستقل از نرخ تک کریستال توسعه دادند. آنها با استفاده از این تئوری، روابطی را برای کسری از توان تنش پلاستیک تبدیل شده به حرارت و کاهش نابجایی ها طی عملیات حرارتی ارائه کردند [۵]. با وجود این، آنها فقط به ارائه روابط تئوری پرداخته و الگوریتم عددی برای پیاده سازی روابط خود ارائه ندادند. مک برید و همکاران در سال ۲۰۱۵ به پیاده سازی عددی مدل آناند [۵] با روش اجزای محدود پرداخته و با کمک آن به شبیه سازی مسائل سه بعدی 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 انرژی ذخیره شده در داخل ریزساختار ارائه داده و یک تطابق کمی مناسب میان نتایج شبیه سازی 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]. آناند و همکاران در سال ۲۰۰۴ یک تئوری پیوسته<sup>۸</sup> کلاسیک، تغییر شکل بزرگ<sup>۹</sup> و سازگار با قوانین ترمودینامیک<sup>۱۰</sup> برای تک کریستال ها با رفتار الاستیک-ویسکوپلاستیک ارائه داده و تغییر شکل بزرگ پلی کریستال<sup>۱۱</sup> مس را با روش اجزای محدود شبیه سازی کردند [۷]. گورتین و همکاران با در نظر گرفتن نابجایی های ضروری هندسی<sup>۱۲</sup> یک ساختار پیوسته برای پلاستیسیته گرادیان کرنش ارائه دادند [۹]. مدل آنها بر مبنای سیستمی از تعادل نیروهای میکرو بود که از اصل توان مجازی که شامل ترم های کرنش پلاستیک و گرادیان کرنش پلاستیک بود استخراج می شد. آنها با استفاده از مدلشان توانستند رفتارهای غیر کلاسیک مواد همانند اثرات اندازه در سطح میکرو را مدل سازی کنند.

مدل های کریستال پلاستیسیته همچنین به عنوان ابزاری قوی برای نمایش توزیع انرژی ذخیره شده در ریزساختار و به دنبال آن تغییر ریزساختار طی فرایندهای ترمومکانیکی شناخته می شوند. 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<sup>۱۳</sup>، شبیه سازی کردند که در آن مکان های جوانه زنی بر مبنای توزیع غیرهمگن محلی از چگالی نابجایی ها در عرض مرزانه ها یا داخل دانه تعیین می شدند [۱۰]. استوجاکویچ و همکاران یک گام از نورد سبک روی ماده فولاد الکتریکی آهن-سیلیکون را با استفاده از مدل کریستال پلاستیسیته کالیدیندی و همکاران [۱۱] شبیه سازی کردند [۱۲]. آنها مشاهده کردند که دانه هایی با جهت گیری فایبر لاند<sup>۱۴</sup> که دارای فاکتور تبلور<sup>۱۵</sup> پایین تری نسبت به جهات دیگر هستند، دارای انرژی ذخیره شده تغییر شکل کمتری هستند. آنها همچنین با مقایسه نتایج خود با نتایج تجربی نتیجه گرفتند که این جهات کریستالی طی عملیات حرارتی بعد از نورد سبک، تقویت می شوند. با وجود این، آنها شبیه سازی دقیقی از توزیع انرژی ذخیره شده در داخل هر دانه انجام ندادند و مدل کریستال پلاستیسیته مورد استفاده آنها وابسته به چگالی نابجایی نبود.

$$JT : L \geq \psi \quad (1)$$

که متغیرهای  $\psi$ ،  $T$  و  $L$  به ترتیب نشان‌دهنده انرژی آزاد هلمهولتز<sup>۱۹</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  $JT : L$  بیان‌کننده توان تنش است که در ادامه بر اساس بخش‌های الاستیک و پلاستیک بیان می‌شود.

## ۲-۲- نظریه میکروسینماتیک

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

$$F = F^e F^p \quad (2)$$

که  $F^p$  نشان‌دهنده بخش پلاستیک  $F$  به خاطر لغزش نابجایی‌ها و  $F^e$  بیانگر بخش الاستیک  $F$  به خاطر اتساع و چرخش شبکه کریستالی است. با توجه به اینکه عامل اصلی تغییر شکل پلاستیک حرکت نابجایی‌ها است، تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک  $L^p = \dot{F}^p F^{p-1}$  وابسته به حرکت نابجایی‌ها می‌شود. فرض می‌شود که حرکت نابجایی‌ها روی سیستم‌های لغزش  $\alpha = 1, \dots, N$  در شبکه کریستالی اتفاق بیفتد که هر سیستم لغزش  $\alpha$  از یک بردار نرمال بر صفحه لغزش،  $m_\alpha$  و یک بردار جهت لغزش،  $s_\alpha$  تشکیل شده و  $N$  نشان‌دهنده تعداد کل سیستم‌های لغزش است. بنابراین تانسور نرخ اعوجاج پلاستیک توسط نرخ‌های میکروبرش  $\dot{\gamma}^\alpha$  روی سیستم‌های لغزش  $\alpha$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha s_\alpha^\alpha \otimes m_\alpha^\alpha \quad (3)$$

که تانسور مرتبه دوم  $S_\alpha^\alpha = s_\alpha^\alpha \otimes m_\alpha^\alpha$  به عنوان تانسور اشمید<sup>۲۰</sup> شناخته می‌شود.

## ۲-۳- تانسور کرنش الاستیک و توان تنش

در مطالعه حاضر، تانسور کرنش الاستیک به فرم زیر تعریف می‌شود:

بنابراین هدف این مقاله، بررسی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در آغاز حرکت مرزخانه در مواد پلی کریستال فلزی است. در بخش دوم ابتدا یک مدل ساختاری تغییر شکل بزرگ سه بعدی، سازگار با قوانین ترمودینامیکی توسعه داده می‌شود 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>۱۶</sup> از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT، توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال در دو حالت مدل تیلور<sup>۱۷</sup> و مدل اجزا محدود کامل<sup>۱۸</sup> مورد بررسی قرار می‌گیرد. همچنین، رابطه میان توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل پلی کریستال و حرکت مرزخانه مورد بررسی قرار می‌گیرد.

## ۲- معادلات ساختاری

در این بخش، همه معادلات ساختاری و قوانین ترمودینامیک در هیئت مرجع توسعه داده می‌شوند و به عنوان نخستین فرض، نیروهای اینرسی و حجمی در نظر گرفته نمی‌شوند. علاوه بر این، تئوری ساختاری تحت شرایط هم‌دما توسعه داده می‌شود و مقدار کار پلاستیک که به حرارت تبدیل می‌شود، محاسبه نمی‌شود. با وجود این، وابستگی متغیرها به دما هنوز لحاظ می‌شوند چرا که شرایط هم‌دما می‌تواند در هر دمایی در نظر گرفته شود. به منظور ارائه مدل ساختاری تغییر شکل بزرگ برای شرح دادن تغییرات چگالی نابجایی در دانه‌های پلی کریستال تحت بارگذاری مکانیکی، تئوری ساختاری تغییر شکل کوچک آناند و همکاران [۵] اصلاح و توسعه داده می‌شود. با ساده‌سازی تئوری گرادیان کرنش آناند و همکاران، فقط نابجایی‌های ذخیره شده از لحاظ آماری در نظر گرفته می‌شوند. بنابراین تئوری ارائه شده به عنوان یک تئوری گرادیان کرنش نیست.

## ۲-۱- قانون دوم ترمودینامیک

شکل محلی قانون دوم ترمودینامیک در هیئت مرجع به صورت زیر بیان می‌شود:

ناججایی‌های جدید و اثر متقابل ناججایی‌ها با یکدیگر مکانیزم‌های اصلی سخت‌شوندگی در سطح میکرو هستند. معادلات مرتبط با تغییرات چگالی ناججایی بر اساس بخش تولید ناججایی‌ها و بخش کاهش ناججایی‌های مرتبط با عملیات حرارتی به دست می‌آیند. بنابراین در این مقاله، فرض می‌شود که ناججایی‌ها طبق رابطه ساختاری پدیدارشناسی<sup>۳۳</sup> زیر تغییر می‌کنند:

$$\dot{\rho}^\alpha = K_1 \sqrt{\rho^\alpha} |\dot{\gamma}^\alpha| - K_2 \rho^\alpha, \quad \rho_{t=0}^\alpha = \rho_0^\alpha \quad (10)$$

جمله نخست از سمت راست معادله (۸)، تولید ناججایی‌ها در طی تغییر شکل پلاستیک را نشان می‌دهد که  $K_1 \geq 0$  نشان‌دهنده ضریب انباشتگی ناججایی‌ها است. جمله دوم از سمت راست بیانگر کاهش ناججایی‌ها بر اثر عملیات حرارتی است که  $K_2 \geq 0$  نشان‌دهنده نرخ بازیابی است.  $\rho^\alpha$  نشان‌دهنده چگالی ناججایی اولیه است. گفتنی است که در این معادله برای انباشتگی چگالی ناججایی، معمولاً یک حد اشباع در نظر گرفته می‌شود [۵]. با وجود این، چون موارد تحقیق شده در این مقاله همگی تحت کشش ساده حداکثر تا ۳۴ درصد کرنش هستند، فرض می‌شود که چگالی ناججایی کمتر از حد اشباع باشد.

با استفاده از قانون دوم ترمودینامیک، معادله ساختاری زیر برای تنش الاستیک به دست می‌آید:

$$\mathbf{T}^e = \frac{\partial \psi^e}{\partial \mathbf{E}^e} = \mathbf{C} [\mathbf{E}^e - (\theta - \theta_0) \alpha_{th} \mathbf{I}] \quad (11)$$

که به دنبال آن تانسور تنش کوشی به صورت زیر از تانسور تنش الاستیک به دست می‌آید:

$$\mathbf{T} = \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}^e \mathbf{T}^e \mathbf{F}^{eT} \quad (12)$$

رابطه زیر به عنوان قانون جریان ویسکوپلاستیک برای ارتباط دادن نرخ میکرو برش  $\dot{\gamma}^\alpha$  به  $\tau^\alpha$  برای هر سیستم لغزش  $\alpha$  استفاده می‌شود:

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0^\alpha \left( \frac{|\tau^\alpha| - a \mu b^\mu K_1 \sqrt{\rho^\alpha}}{S^\alpha} \right)^{1/m} \text{sign}(\tau^\alpha) \quad (13)$$

که پارامترهای  $\dot{\gamma}_0^\alpha$  و  $m$  به ترتیب بیان کننده نرخ برش مرجع و

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{\nu} (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}) \quad (4)$$

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

$$\mathbf{J} \mathbf{T} : \mathbf{L} = \mathbf{T}^e : \dot{\mathbf{E}}^e + \sum_{\alpha=1}^N \tau^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (5)$$

که جمله نخست از سمت راست معادله (۵) نشان‌دهنده توان تنش الاستیک، و قسمت دوم نشان‌دهنده توان تنش پلاستیک است و تنش برشی تجزیه شده<sup>۳۱</sup>  $\tau^\alpha$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tau^\alpha = \mathbf{C}^e \mathbf{T}^e : \mathbf{S}_0^\alpha, \quad \mathbf{C}^e = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{C} \mathbf{F}^e \quad (6)$$

## ۲-۴- انرژی آزاد

با استفاده از اصل عدم تفاوت نسبت به چارچوب مادی و در نظر گرفتن کارهای فرید و گورتین [۱۴]، گورتین و همکاران [۱۵] و آناند و همکاران [۵]، انرژی آزاد هلمهولتز بر واحد حجم به صورت زیر قابل تجزیه است:

$$\psi = \psi^e + \psi^p \quad (7)$$

که  $\psi^e$  نشان‌دهنده انرژی آزاد ترموالاستیک است:

$$\psi^e = \frac{1}{\nu} [\mathbf{E}^e - (\theta - \theta_0) \alpha_{th} \mathbf{I}] : \mathbf{C} \frac{1}{\nu} [\mathbf{E}^e - (\theta - \theta_0) \alpha_{th} \mathbf{I}] \quad (8)$$

پارامترهای  $\theta_0$ ،  $\mathbf{C}$  و  $\alpha_{th}$  به ترتیب بیان کننده دمای مرجع، تانسور مدول الاستیک و ضریب انبساط حرارتی هستند.

$\psi^p$  بیان کننده انرژی آزاد پلاستیک/عیوب است:

$$\psi^p = a \mu b^\mu \sum_{\alpha=1}^N \rho^\alpha \quad (9)$$

که متغیرهای  $\mu$  و  $b$  به ترتیب بیان کننده مدول برشی و قدر مطلق بردار برگرز<sup>۳۲</sup> بوده و پارامتر  $a$  یک ثابت به طور تقریبی برابر با ۰/۵ است.  $\rho^\alpha$  با  $\alpha = 1, \dots, N$  نشان‌دهنده چگالی ناججایی مرتبط با سیستم لغزش  $\alpha$  است.

با توجه به اینکه تغییر شکل پلاستیک به عنوان یک تغییر شکل دائمی بر اثر حرکت ناججایی‌ها ایجاد می‌شود، ایجاد

جدول ۱- سیستم‌های لغزش استفاده شده برای شبیه‌سازی تک کریستال آلومینیوم

$S_0^\alpha$	$m_0^\alpha$	$\alpha$
۱۱۰	۱۱۱	۱
۱۰۱	۱۱۱	۲
۰۱۱	۱۱۱	۳
۱۰۱	۱۱۱	۴
۱۱۰	۱۱۱	۵
۰۱۱	۱۱۱	۶
۱۰۱	۱۱۱	۷
۰۱۱	۱۱۱	۸
۱۱۰	۱۱۱	۹
۱۱۰	۱۱۱	۱۰
۱۱۰	۱۱۱	۱۱
۰۱۱	۱۱۱	۱۲

سخت شوندگی مربوط به مدل ساختاری با استفاده از نتایج تجربی موجود برای تک کریستال‌های آلومینیوم کالیبره شوند.

### ۱-۳- شبیه‌سازی تک کریستال آلومینیوم

از نتایج تجربی هاسفورد و همکاران [۱۷] روی تک کریستال‌های آلومینیوم  $\langle 111 \rangle$  و  $\langle 100 \rangle$  برای کالیبره کردن مدل کریستال پلاستیسیته بر مبنای چگالی نابجایی ارائه شده استفاده می‌شود. پارامترهای سخت شوندگی از طریق برازش نتایج شبیه‌سازی با منحنی‌های تنش- کرنش تجربی به دست می‌آیند. برای شبیه‌سازی تک کریستال‌ها از مکعب ساده با المان‌های آجری پیوسته سه بعدی هشت گره‌ای استفاده شده است. تغییر شکل به صورت جابه‌جایی با نرخ کرنش ثابت  $s^{-1} \times 10^{-3} \times 1/7$  در دمای ۲۷۳ درجه کلوین به نمونه اعمال می‌شود. برای اعمال نرخ کرنش ثابت در حین بارگذاری از زیربرنامه UAMP در نرم‌افزار آباکوس استفاده می‌شود. جدول (۱) سیستم‌های لغزش استفاده شده برای شبیه‌سازی ماده آلومینیوم را نشان می‌دهد.

توسط معادلات سخت‌شوندگی زیر به دست می‌آیند [۱۶]:

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

که  $h^{\alpha\beta}$  ماتریس سخت‌شوندگی است.

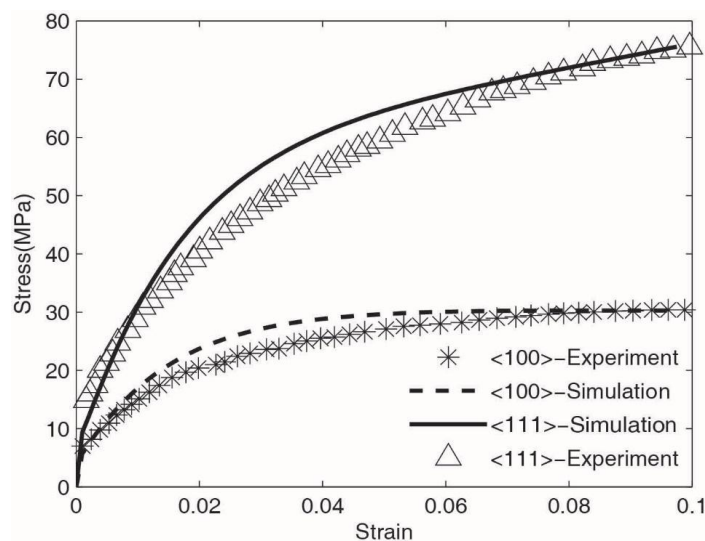
در این مطالعه پارامترهای سخت‌شوندگی  $\{\rho_0^\alpha, m, K_1, K_2, \dot{\gamma}^\alpha\}$  از طریق برازش نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی به دست می‌آیند. معادلات ساختاری در نرم‌افزار آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT پیاده‌سازی می‌شوند.

### ۳- نتایج و بحث

در این بخش، از مدل ساختاری توسعه داده شده برای شبیه‌سازی نمونه‌های پلی کریستال آلومینیوم تحت بارگذاری مکانیکی استفاده می‌شود تا توزیع انرژی ذخیره شده در ریزساختار بررسی شده و ارتباط آن با تغییرات ریزساختار ناشی از اختلاف انرژی ذخیره شده در دو طرف مرزدانه مورد بحث قرار گیرد. برای این منظور، در ابتدا باید پارامترهای

جدول ۲- پارامترهای مادی استفاده شده برای شبیه‌سازی تک‌کریستال آلومینیوم

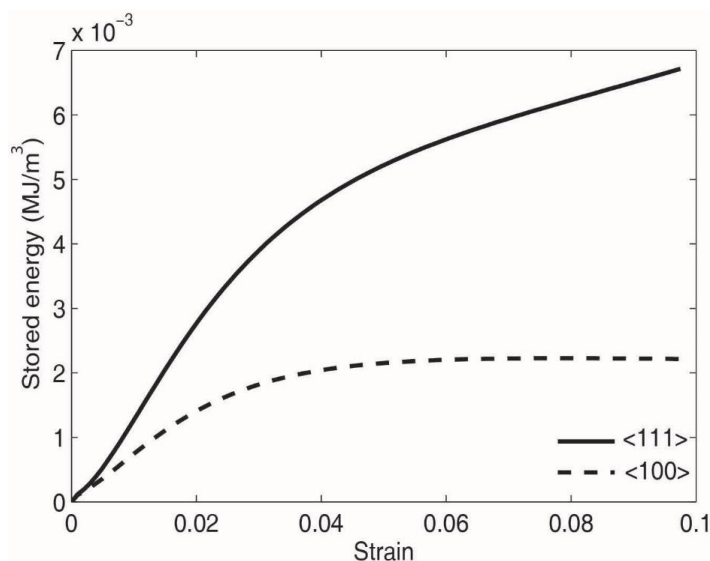
$C_{11} = 108 \text{ GPa}$	ثابت‌های الاستیک
$C_{12} = 61/3 \text{ GPa}$	
$C_{44} = 28/5 \text{ GPa}$	
$\mu = 25 \text{ GPa}$	
$b = 2/86 \text{ nm}$	بردار برگرز
$m = 0/011$	قانون جریان
$\dot{\gamma}_0^\alpha = 0/001, \alpha = 1, \dots, 12$	
$K_1 = 250 \mu\text{m}^{-1}$	پارامترهای سخت‌شوندگی
$K_2 = 0/01 \text{ s}^{-1}$	
$\rho_0^\alpha = 0/01 \mu\text{m}^{-2}, \alpha = 1, \dots, 12$	چگالی نابجایی اولیه



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

آمده از شبیه‌سازی با استفاده از پارامترهای مادی ارائه شده در جدول (۲) را نشان می‌دهد. همان‌طور که این شکل نشان می‌دهد، تطابق خوبی بین نتایج تجربی با نتایج به دست آمده از طریق شبیه‌سازی وجود دارد و اینکه مدل ارائه شده، تفاوت در سخت‌شوندگی بین تک‌کریستال‌های <۱۱۱> و <۱۰۰> را به خوبی مدل‌سازی می‌کند. مطابق شکل (۱)، نرخ سخت‌شوندگی در تک‌کریستال <۱۱۱> سریع‌تر از تک‌کریستال <۱۰۰> است

جدول (۲) ثابت‌های مادی استخراج شده از مراجع و پارامترهای مادی کالیبره شده برای شبیه‌سازی تک‌کریستال‌ها را نشان می‌دهد. پارامترهای نرخ برشی مرجع،  $\dot{\gamma}_0^\alpha$  و حساسیت نرخ کرنش،  $m$  همان‌طور که در جدول (۲) نشان داده شده است از کار کالیدیندی و همکاران استخراج شده‌اند [۱۱]. شکل (۱) مقایسه میان نتایج تجربی هاسفورد و همکاران [۱۷] و منحنی‌های تنش- کرنش تک‌کریستال‌های آلومینیوم به دست



شکل ۲- تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل برحسب کرنش برای تک کریستال‌های آلومینیوم

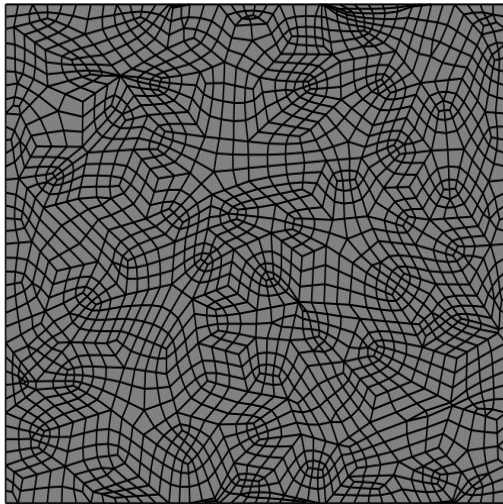
جدول (۲) برای شبیه‌سازی نمونه پلی کریستال آلومینیومی استفاده می‌شود.

### ۲-۳- شبیه‌سازی پلی کریستال آلومینیوم

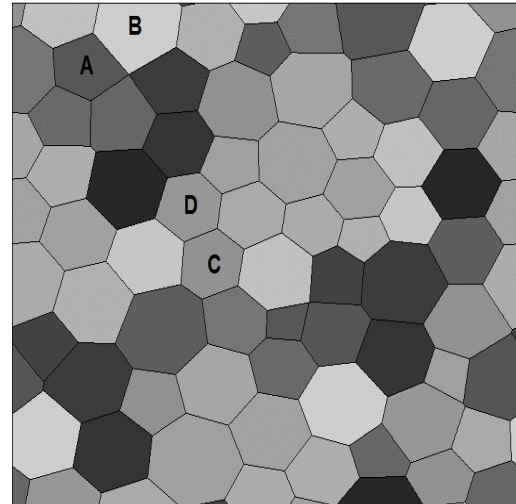
به‌عنوان یک کاربرد از تئوری ساختاری کریستال پلاستیسیته برای محاسبات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر دانه از مواد پلی کریستالی، در این بخش پدیده حرکت مرزدانه کرنش - القایی<sup>۲۴</sup> یا SIBM بررسی می‌شود. پدیده حرکت مرزدانه کرنش - القایی شامل برآمده شدن بخشی از یک مرز است که از قبل موجود بوده و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

تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل برای هر یک از تک کریستال‌ها در شکل (۲) نشان داده شده است. انرژی ذخیره شده تغییر شکل از رابطه  $\sum_{\alpha=1}^N \rho^{\alpha} \mu b^2$  محاسبه می‌شود. به‌صورت خلاصه، در ابتدا جمع چگالی نابجایی‌ها روی سیستم‌های لغزش،  $\sum_{\alpha=1}^N \rho^{\alpha}$  برای هر یک از نقاط انتگرال‌گیری محاسبه شده و سپس انرژی ذخیره شده تغییر شکل از رابطه بالا محاسبه می‌شود. در نهایت، مقادیر انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مقیاس ماکرو که میانگین حجمی از انرژی‌های ذخیره شده تغییر شکل محلی در کل مدل هستند، محاسبه می‌شوند. همان‌طور که از شکل (۲) نمایان است، تفاوت در تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل موجب تفاوت در نرخ‌های سخت‌شوندگی میان دو نوع تک کریستال می‌شود. مطابق شکل (۲)، تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل به‌شدت وابسته به جهت‌گیری کریستال‌ها بوده که هر کریستال با جهت منحصر به‌فرد دارای انرژی ذخیره شده تغییر شکل معینی است که با کریستال‌های دیگر متفاوت است. در بخش بعدی، از مدل ارائه شده با پارامترهای موجود در





(ب)



(الف)

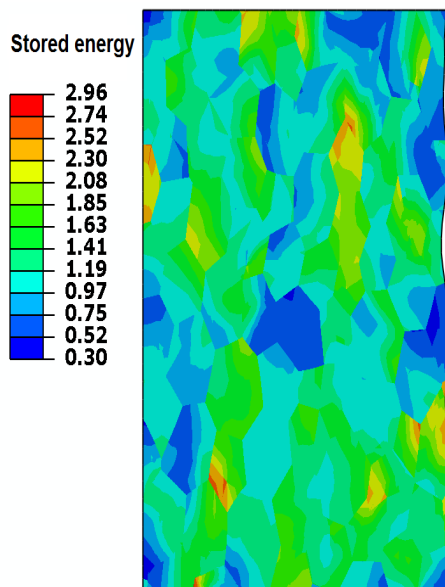
شکل ۳- الف) مدل اجزای محدود اولیه از ریزساختار شبیه‌سازی شده که هر رنگ نشان‌دهنده یک دانه با جهت کریستالی مجزا است، ب) شبکه اجزا محدود اولیه برای شبیه‌سازی پلی کریستال آلومینیوم (رنگی در نسخه الکترونیکی)

نتایج شبیه‌سازی برای توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل ریزساختار 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 دانه‌های دیگر متفاوت است. زیرا همان‌طور که قبل از این گفته شد هر دانه دارای ظرفیت انرژی ذخیره شده تغییر شکل معینی است. برای شبیه‌سازی پلی کریستال آلومینیوم با فرض مدل تیلور، یک مربع با یک المان مربعی کرنش صفحه‌ای چهار گره‌ای در نظر گرفته می‌شود و به نقطه انتگرال‌گیری آن ۶۴ دانه اختصاص داده می‌شود که جهت‌های کریستالی تخصیص داده شده به دانه‌ها به‌طور دقیق مشابه با حالت مدل ورونی است. کشش ساده روی این نقطه انتگرال‌گیری به صورت جابه‌جایی با نرخ کرنش ثابت  $s^{-1} 10^{-3} \times 1/7$  در دمای ۲۷۳ درجه کلون اعمال می‌شود.

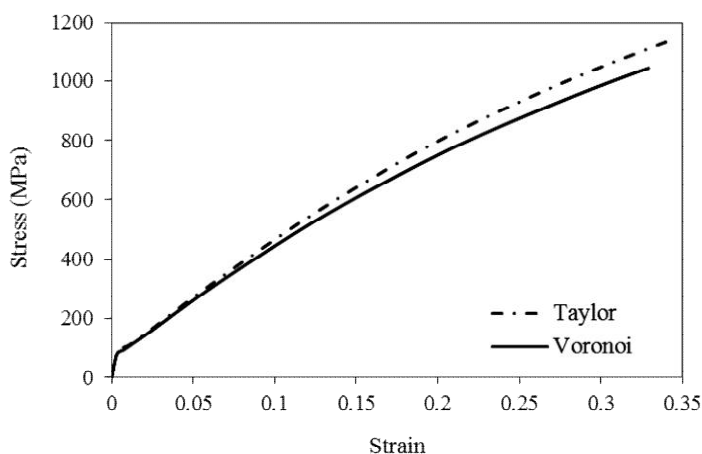
تغییرات تنش برحسب کرنش برای هر دو مدل تیلور و ورونی در شکل (۵) نشان داده شده است. همان‌طور که از این شکل مشخص است منحنی تنش برحسب کرنش در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل تقریباً یکسان است و هر دو مدل رفتار یکسانی را نشان می‌دهند. تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر

دقیق‌تر محاسبه کنند.

حجمک نماینده<sup>۲۵</sup> 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>۲۶</sup> ساخته شد که توضیحات دقیق‌تر در مورد روش ساخت این مدل در مراجع [۱۸] موجود است. به هر یک از دانه‌های این حجمک نماینده یک جهت‌گیری کریستالی اتفاقی تخصیص داده می‌شود 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 می‌دهد که شامل ۲۰۴۲ المان مربعی کرنش صفحه‌ای چهار گره‌ای است. قابل ذکر است که استقلال نتایج از تعداد المان‌ها برای این مدل مورد بررسی قرار گرفته است. برای اعمال کشش ساده روی نمونه، کشش روی سطح بالایی به صورت جابه‌جایی با نرخ کرنش ثابت  $s^{-1} 10^{-3} \times 1/7$  در دمای ۲۷۳ درجه کلون اعمال می‌شود. برای اعمال نرخ کرنش ثابت در حین بارگذاری از زیربرنامه UAMP استفاده می‌شود.



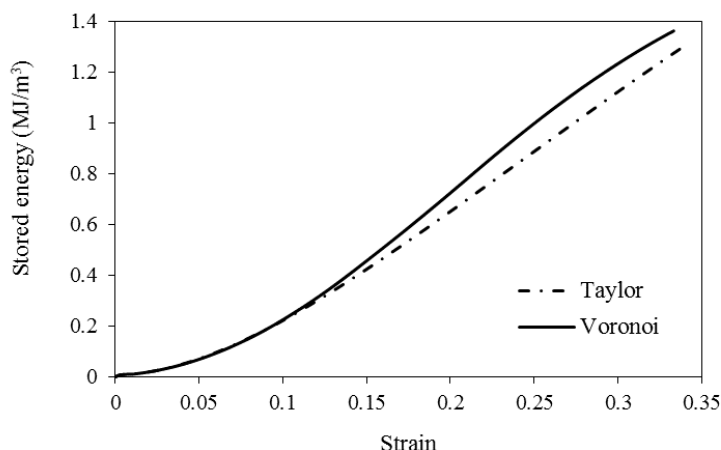
شکل ۴- نتایج شبیه‌سازی برای توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در ریزساختار (رنگی در نسخه الکترونیکی)



شکل ۵- مقایسه میان منحنی تنش- کرنش به دست 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 دانه‌ها، دو جفت دانه مجاور هم در دو ناحیه متفاوت از مدل ورونی انتخاب می‌شوند. این دو جفت دانه مجاور در شکل (۳-الف) یکی با حروف A-B و دیگری با حروف C-D مشخص شده‌اند. روند تغییرات میانگین حجمی انرژی ذخیره شده تغییر شکل با کرنش برای هر یک از جفت دانه‌های مجاور A-B و C-D به ترتیب در شکل‌های (۷-الف) و (۸-الف) نشان داده شده است. همان‌طور که از این شکل‌ها نمایان است،

شکل برحسب کرنش در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل نیز در شکل (۶) نشان داده شده است. این شکل نیز نشان می‌دهد که انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مقیاس ماکرو برای هر دو مدل یکسان است. در ادامه برای بررسی دقیق‌تر رفتار هر یک از دو مدل ورونی و تیلور در بعد میکرو، به بررسی انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر یک از دانه‌ها پرداخته می‌شود و ارتباط آن با حرکت مرزدانه از طریق بررسی تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دو طرف مرزدانه مورد بررسی قرار می‌گیرد.



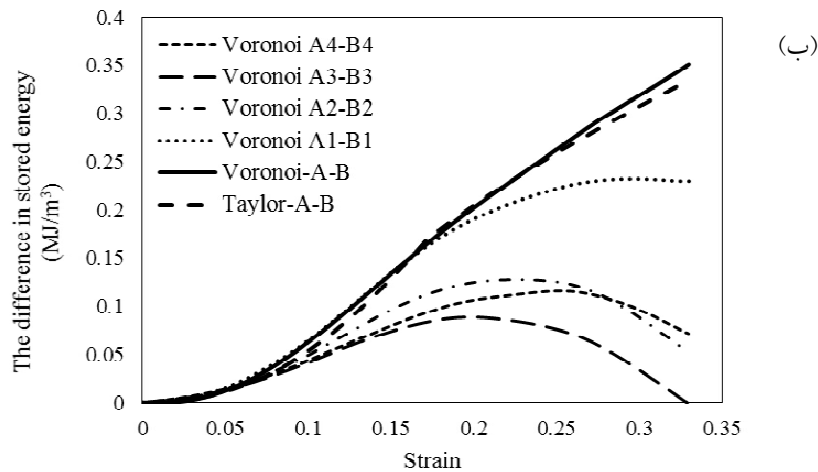
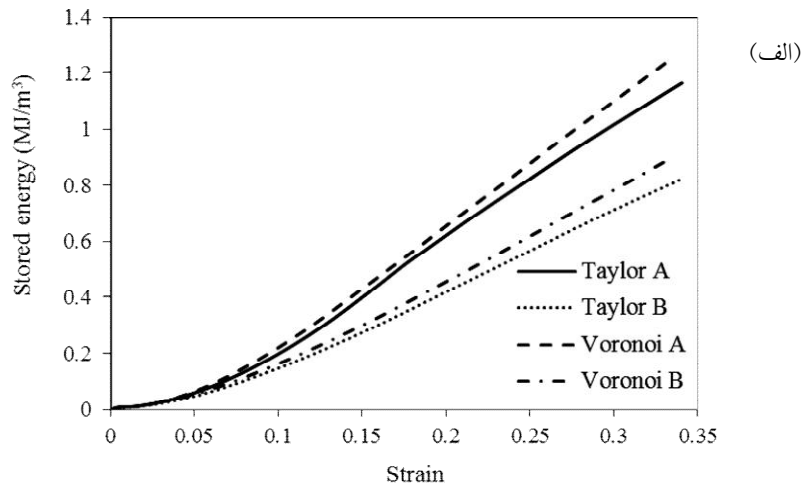
شکل ۶- مقایسه میان منحنی انرژی ذخیره شده تغییر شکل به دست آمده از شبیه‌سازی در مقیاس ماکرو از طریق مدل تیلور و مدل ورونی

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

طبق مطالعات تجربی انجام شده، تغییرات ریزساختار در طول عملیات حرارتی برای فلز کار 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 جزئی‌تر تفاوت انرژی ذخیره شده میان دانه‌های مجاور، روی المان‌های مجاور دو طرف مرزدانه‌های A-B و C-D از ریزساختار شکل (۳-ب) که در شکل (۹) به صورت برجسته نشان داده شده است متمرکز می‌شویم. روند تغییرات تفاوت انرژی ذخیره شده میان دانه‌های مجاور A-B و C-D و المان‌های مجاور برجسته شده آنها، به ترتیب در شکل‌های (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 می‌دهد 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 المان‌های مجاور

هر دو مدل روند تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل هر یک از دانه‌ها را به خوبی مدل می‌کنند. 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 منحنی‌های به دست آمده از دو مدل به طور تقریبی یکسان است. این نتایج برای بررسی تغییرات ریزساختار در طول عملیات حرارتی روشن‌گر است زیرا تفاوت بین انرژی‌های ذخیره شده در دانه‌های مجاور باعث حرکت مرزدانه از طریق SIBM می‌شود. هر دو مدل بیان می‌کنند که بعد از اعمال تغییر شکل و قرار گرفتن پلی کریستال در دمای بالا، دانه‌های A و D به ترتیب به سمت دانه‌های B و C هجوم می‌برند زیرا مطابق اصول ترمودینامیک، حرکت مرزدانه در جهتی است که منجر به کاهش انرژی ذخیره شده تغییر شکل در ماده شود.

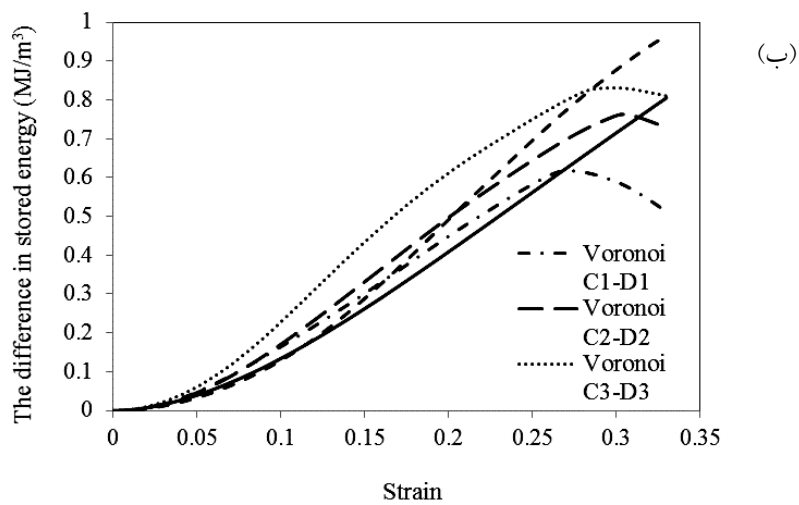
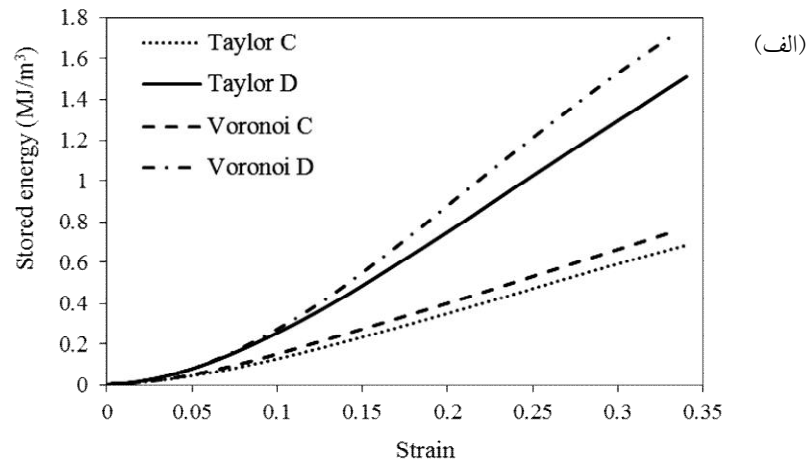
در مرحله رشد، اگر فشار ترمودینامیکی خالص وارد بر مرزدانه برابر با P باشد، مرزدانه با سرعت  $V=MP$  حرکت می‌کند که در این رابطه M ضریب تحرک<sup>۳۷</sup> مرزدانه است. به طور کلی فرض می‌شود که سرعت مرزدانه رابطه خطی با فشار خالص وارد بر آن از طریق ثابت M دارد [۱]. در مطالعه حاضر، با توجه به اینکه نیروی محرک وارد بر مرزدانه C-D بیشتر از مرزدانه A-B است، SIBM در مرزدانه C-D نسبت



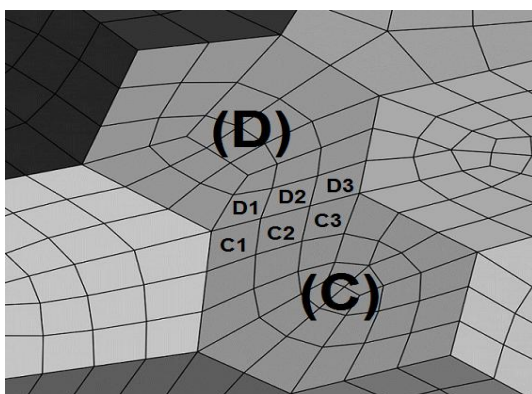
شکل ۷-الف) روند تغییرات انرژی ذخیره شده تغییر شکل در دانه‌های مشخص شده A و B در شکل (۳-الف)، (ب) روند تغییرات تفاوت انرژی ذخیره شده تغییر شکل میان دانه‌های A و B و المان‌های مجاور مرز دانه نشان داده شده در شکل (۹)

کرنش- القایی مرزدانه را شبیه‌سازی کند. برای شبیه‌سازی دقیق حرکت کرنش- القایی مرزدانه نیاز است تا مدل‌سازی 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 می‌دهد، قابل برداشت است. به عبارت دیگر، حرکت کرنش- القایی مرزدانه در یک ریزساختار پلی کریستال تحت تغییر شکل پلاستیک، به شدت وابسته به توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل ریزساختار و نه مقادیر حجمی میانگین آنها است.

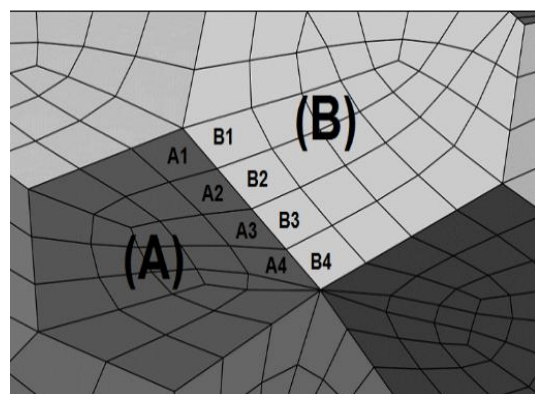
مختلف با میانگین حجمی به دست آمده از طریق مدل تیلور و مدل ورونی متفاوت است. به عنوان مثال با افزایش کرنش، نیروی محرک مورد نیاز برای SIBM بین کل المان‌های مجاور دانه‌های A و B همانند A1-B1 و A2-B2 در ابتدا افزایش و سپس کاهش می‌یابد در صورتی که نیروی محرک مورد نیاز برای SIBM بر اساس میانگین حجمی بین دانه‌های مجاور همواره با کرنش افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه مطابق شواهد تجربی، توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در مجاورت مرزدانه‌ها بر نرخ SIBM تأثیر ویژه‌ای دارد، این شکل نشان می‌دهد که مدل تیلور نمی‌تواند به خوبی حرکت



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 مرز دانه نشان داده شده در شکل (۹)



(ب)



(الف)

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

## ۴- نتیجه گیری

سخت شونده‌گی تک کریستال‌های  $<100>$  و  $<111>$  با دقت قابل قبولی مدل‌سازی شد.

۲- برای بررسی توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل دانه‌ها و ارتباط آن با تغییرات ریزساختار از طریق حرکت کرنش-القایی مرزدانه، نمونه‌های پلی کریستال آلومینیوم تحت کشش در دو حالت مدل تیلور و مدل اجزای محدود کامل شبیه‌سازی شدند. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که مدل اجزای محدود کامل نسبت به مدل تیلور، توزیع انرژی ذخیره شده تغییر شکل در داخل دانه را بهتر مدل‌سازی می‌کند؛ بنابراین قادر است حرکت مرزدانه در طی فرایند عملیات حرارتی بعد از تغییر شکل را به‌گونه‌ای دقیق‌تر پیش‌بینی کند.

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 نرم‌افزار اجزای محدود آباکوس از طریق نوشتن زیربرنامه UMAT پیاده‌سازی شدند. به‌طور خلاصه نتایج زیر از شبیه‌سازی‌های عددی به‌دست آمدند:

۱- منحنی‌های تنش-کرنش از تک کریستال‌های آلومینیوم با دقت قابل قبولی شبیه‌سازی شدند و تفاوت رفتار

## واژه‌نامه

- |                                  |   |  |
|----------------------------------|---|--|
| 1. dislocation                   | 11. polycrystalline                     | 21. resolved shear stress                          |
| 2. point defects                 | 12. geometrically necessary dislocation | 22. Burgers vector                                 |
| 3. stored deformation energy     | 13. cellular automaton                  | 23. phenomenological                               |
| 4. microstructure                | 14. launda fiber                        | 24. strain induced grain boundary migration (SIBM) |
| 5. grain boundary                | 15. Taylor factor                       | 25. representative volume element                  |
| 6. single crystal                | 16. Abaqus                              | 26. Voronoi-Tessellation Method                    |
| 7. crystal plasticity            | 17. Taylor model                        | 27. mobility                                       |
| 8. continuum                     | 18. full finite element model           |  |
| 9. finite deformation            | 19. Helmholtz free energy               |  |
| 10. thermodynamically consistent | 20. Schmid tensor                       |  |

## مراجع

1. Humphreys, M., and Hatherly, F., *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Second Edition, Elsevier, 2004.
2. Bever, M., Holt, D., and Titchener, A., "The Stored Energy of Cold Work", *Progress in Materials Science*, Vol. 17, pp. 5-177, 1973.
3. 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.
4. 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.
6. McBride, A., Bargmann, S., and Reddy, B., "A Computational Investigation of a Model of Single-crystal Gradient Thermoplasticity that Accounts for the Stored Energy of Cold Work and Thermal Annealing", *Computational Mechanics*, Vol. 55, pp. 755-769, 2015.
7. 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.
8. 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.

9. 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.
10. 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.
11. 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  $\langle 001 \rangle$  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.
14. 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.
15. 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.
16. 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.
18. 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.