

國立臺灣大學工學院土木工程學研究所

碩士論文

Department of Civil Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis



晶體塑性模型與基於深度學習之多尺度模擬於鋁合金  
之應用

Crystal Plasticity Model and Deep Learning Based  
Multi-scale Simulation for Aluminum Alloys

簡子堯

Tzu-Yao Chien

指導教授：陳俊杉 博士

Advisor: Chuin-Shan Chen, Ph.D.

中華民國 112 年 8 月

August, 2023

國立臺灣大學碩士學位論文  
口試委員會審定書  
MASTER'S THESIS ACCEPTANCE CERTIFICATE  
NATIONAL TAIWAN UNIVERSITY

(論文中文題目) (Chinese title of Master's thesis)

晶體塑性模型與基於深度學習之多尺度模擬於鋁合金之應用

(論文英文題目) (English title of Master's thesis)

Crystal plasticity and Deep Learning Based Multi-scale Simulation for Aluminum Alloys

本論文係 簡子堯 (姓名) R09521605 (學號) 在國立臺灣大學  
土木工程系 電腦輔助工程組 (系/所/學位學程) 完成之碩士學位論文，於民國 112 年  
7 月 17 日承下列考試委員審查通過及口試及格，特此證明。

The undersigned, appointed by the Department / Institute of Computer-Aided Engineering group, Civil Engineering  
on 17 (date) 7 (month) 112 (year) have examined a Master's thesis entitled above presented  
by 簡子堯 (name) R09521605 (student ID) candidate and hereby certify  
that it is worthy of acceptance.

口試委員 Oral examination committee:

陳以川  
(指導教授 Advisor)

顏以成

黃謙峰

系主任/所長 Director:

葛宇宙



## 誌謝

首先我要感謝指導教授陳俊杉老師，從我當實習生開始就一直提供了大量的研究資源，儘管碩士意外的讀到了第三年，老師還是非常有耐心的提供研究方向與建議，另一方面也給予了許多參與國際研討會的機會，讓我在其中受益良多。感謝顏鴻威老師，願意在百忙之中抽空擔任口試委員，點出了許多研究還可以再精進的地方以及建議，另外也在參與合作的計畫中提供了許多材料背景的相關知識指導。感謝黃琮暉老師，儘管在研究中比較少機會跟老師交流，也願意從新竹大老遠跑來擔任口試委員，提出了許多研究成果的修正建議。

非常謝謝翊良學長，從研究的交接開始到學長畢業去公司上班，都持續的傳授我許多研究的技巧。謝謝東垣學長，常常主動來關心我的研究狀況，一起討論研究相關領域的最新現況，幫助我理清研究的方向脈絡。謝謝廷儒、國碩、遠同和琮瑋，雖然跟研究無關，不過跟你們一起參與的競賽非常有趣而且也學習到很多。也謝謝幾次一起參與暑期實習的夥伴們，雖然我可能不是很會帶人，不過與你們一起完成專題非常的有成就感。非常感謝女朋友絹宜，研究不順利時總是一直陪著我，給予了我很多精神上的鼓勵，讓我有動力繼續面對挑戰。最後，我要感謝我的家人給予我經濟上的支持以及關心，讓我可以完成碩士學位。



## 摘要

多尺度模擬被廣泛應用於探討微結構至非彈性機械性質，然而傳統上使用直接數值模擬 (direct numerical simulation, DNS) 同步的進行宏觀尺度的力學分析以及微觀尺度的材料模擬會耗費大量的計算資源，導致模擬的尺度受到了極大的限制。因此，本研究的目的為利用深度學習技術建立多尺度模擬平台，將 DNS 方法中微觀尺度的材料模型替換為基於機器學習的代理材料模型，利用代理材料模型極高的線上運算效率，深化多尺度模擬於工業等級尺度的應用價值。

本研究針對 Al-Mg-Si 高強度車用鋁合金以晶體塑性 (crystal plasticity) 建立 DNS 材料模型，透過 TEM 影像、EBSD 分別獲取析出物物理參數以及晶體方向，此外，有鑑於鋁合金成型製程中常以中溫、高溫增加其延展性，導致鋁合金中析出物物理參數在成型過程中受到溫度效應影響而改變，因此本研究將析出物動力模型整合至晶體塑性模型，並與不同溫度下的拉伸實驗進行參數校正及驗證。

透過 DNS 材料模型產生資料，本研究訓練了基於循環神經網路 (recurrent neural network, RNN) 的代理材料模型，訓練結果顯示該模型能夠捕捉任意複雜變形下的歷史相關應力應變行為，並且能夠泛用到訓練資料集外的變形行為。此外，本研究亦將代理材料模型結合 Abaqus 材料副程式建立數據驅動多尺度模擬平台，並探討利用自動微分技術進行的隱式迭代求解的運算效率。

**關鍵字：**鋁合金、析出物、晶體塑性、循環神經網路、多尺度模擬





# Abstract

Multiscale simulation is widely used in modeling microstructure-induced inelastic mechanical behavior. However, conventional direct numerical simulation (DNS) performs mechanics analysis at the macroscale, and concurrently, performs material simulation at the microscale, leading to an expensive computational cost that makes the process infeasible. In this work, we aim to develop a data-driven multiscale simulation (DDMS) platform, in which a machine learning-based surrogate material model replaces the DNS model. We utilized the surrogate material model's extreme online prediction efficiency to increase the multiscale simulation's feasibility for large-scale applications. We proposed a crystal plasticity DNS material model for Al-Mg-Si high-strength aluminum alloys with physical parameters such as precipitate size distribution and crystallographic orientation obtained from TEM image and EBSD. In addition, the aluminum forming process at elevated temperatures is commonly used to increase ductility, leading to the dynamic growth of precipitates during the forming process. Therefore, we incorporate precipitation kinetics into the crystal plasticity model and calibrate the model with tensile tests at various temperatures. With the training data generated by the DNS material model, we trained a surrogate material model based on recurrent neural networks (RNN). The training results

showed that the model is capable of capturing the historical stress-strain behavior under arbitrary complex deformations, and can be generalized to deformation behaviors beyond the training dataset. Furthermore, we implemented the surrogate material model in Abaqus material subroutine to establish an DDMS platform, and investigated the computational efficiency of implicit solver utilizing automatic differentiation techniques.

**Keywords:** aluminum alloy, precipitate, crystal plasticity, recurrent neural network, multi-scale simulation



# 目錄

|                             | Page      |
|-----------------------------|-----------|
| 口試委員審定書                     | i         |
| 誌謝                          | ii        |
| 摘要                          | iii       |
| Abstract                    | iv        |
| 目錄                          | vi        |
| 圖目錄                         | ix        |
| 表目錄                         | xii       |
| <b>第一章 緒論</b>               | <b>1</b>  |
| 1.1 研究背景 . . . . .          | 1         |
| 1.2 文獻回顧 . . . . .          | 4         |
| 1.2.1 晶體塑性模型 . . . . .      | 4         |
| 1.2.2 多尺度材料模擬 . . . . .     | 6         |
| 1.2.3 數據驅動多尺度材料模擬 . . . . . | 7         |
| 1.3 研究目的 . . . . .          | 8         |
| 1.4 論文架構 . . . . .          | 8         |
| <b>第二章 理論與方法</b>            | <b>10</b> |
| 2.1 多尺度材料模型 . . . . .       | 10        |



|            |                       |           |
|------------|-----------------------|-----------|
| 2.1.1      | 晶體塑性理論                | 11        |
| 2.1.2      | 材料組成律                 | 13        |
| 2.1.3      | 析出動力模型                | 19        |
| 2.1.4      | 參數設置及實作               | 23        |
| 2.2        | 數據驅動多尺度材料模型           | 30        |
| 2.2.1      | 代理材料模型                | 30        |
| 2.2.2      | 深度學習方法                | 30        |
| 2.2.3      | 模型整合及實作               | 34        |
| 2.3        | 小結                    | 35        |
| <b>第三章</b> | <b>晶體塑性模型驗證與分析</b>    | <b>37</b> |
| 3.1        | 顯微結構參數計算              | 37        |
| 3.1.1      | 析出物參數實驗分析             | 37        |
| 3.1.2      | 析出動力模型模擬分析            | 39        |
| 3.2        | 6111 鋁合金拉伸分析          | 43        |
| 3.2.1      | 實驗設置與拉伸性能             | 43        |
| 3.2.2      | 模型設置                  | 45        |
| 3.2.3      | 常溫拉伸模擬分析              | 45        |
| 3.2.4      | 升溫拉伸模擬分析              | 50        |
| 3.3        | 小結                    | 53        |
| <b>第四章</b> | <b>數據驅動多尺度模擬驗證與應用</b> | <b>55</b> |
| 4.1        | 代理材料模型                | 55        |
| 4.1.1      | 資料集產生                 | 55        |
| 4.1.2      | 訓練方法                  | 57        |

|            |                     |           |
|------------|---------------------|-----------|
| 4.1.3      | 結果與討論 . . . . .     | 60        |
| 4.2        | 數據驅動多尺度模擬 . . . . . | 62        |
| 4.2.1      | 單元素驗證 . . . . .     | 65        |
| 4.2.2      | 懸臂樑彎曲模擬 . . . . .   | 65        |
| 4.2.3      | 狗骨頭單軸拉伸模擬 . . . . . | 67        |
| 4.2.4      | 計算效率 . . . . .      | 69        |
| 4.3        | 小結 . . . . .        | 72        |
| <b>第五章</b> | <b>結論及未來展望</b>      | <b>73</b> |
| 5.1        | 結論 . . . . .        | 73        |
| 5.2        | 未來展望 . . . . .      | 74        |
|            | <b>參考文獻</b>         | <b>76</b> |





## 圖目錄

|                                                               |    |
|---------------------------------------------------------------|----|
| 圖 1 集成計算材料工程 (ICME) 架構應用於探討鋁合金成型模擬之 PSPP 關係 . . . . .         | 2  |
| 圖 2 PSPP 關係圖與計算方法 [1] . . . . .                               | 2  |
| 圖 3 以 (a)DNS、(b) 代理材料模型進行多尺度材料模擬之迭代過程示意圖                      | 3  |
| 圖 4 晶體塑性模型連結微觀機制與材料性質之架構圖 [2] . . . . .                       | 6  |
| 圖 5 晶體變形座標系轉換 [3] . . . . .                                   | 12 |
| 圖 6 材料降伏強度與加工硬化模型組成示意圖 . . . . .                              | 14 |
| 圖 7 有限差分法離散區間示意圖 [4] . . . . .                                | 22 |
| 圖 8 析出動力模型迭代流程圖 [5] . . . . .                                 | 24 |
| 圖 9 TEM 影像分析與析出物參數計算。(a)TEM 暗場影像，(b)TEM 試片中析出物分佈示意圖 . . . . . | 25 |
| 圖 10 全域座標與晶體座標示意圖 [6] . . . . .                               | 28 |
| 圖 11 DAMASK 軟體模組化計算架構 . . . . .                               | 29 |
| 圖 12 DAMASK 中組成律模型相關程式碼示意圖 . . . . .                          | 30 |
| 圖 13 全連接神經網路中 (a) 輸入、隱藏及輸出層，(b) 激活函數之模型架構示意圖 . . . . .        | 32 |
| 圖 14 LSTM 模型架構示意圖 . . . . .                                   | 33 |
| 圖 15 LMSC 模型架構示意圖 . . . . .                                   | 34 |
| 圖 16 多尺度材料模擬計算流程 . . . . .                                    | 35 |
| 圖 17 數據驅動多尺度模擬計算流程 . . . . .                                  | 36 |
| 圖 18 6111 鋁合金時效熱處理製程示意圖 (a) 常溫單軸拉伸試驗 (b) 升溫單軸拉伸試驗 . . . . .   | 38 |

|                                                                                                          |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 圖 19 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之 TEM 影像 (左側) 與 ImageJ 影像處理結果 (中間、右側) . . . . . | 40 |
| 圖 20 析出物數量密度與析出物平均半徑實驗觀測與模擬結果 . . . . .                                                                  | 42 |
| 圖 21 四種時效條件之常溫單軸拉伸結果 (a) 應力應變曲線 (b) 降伏強度 (c) 加工硬化曲線 (d)Kocks-Mecking 圖 . . . . .                         | 44 |
| 圖 22 7 分鐘時效條件之升溫單軸拉伸結果 (a) 應力應變曲線 (b) 降伏強度 . . . . .                                                     | 44 |
| 圖 23 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之晶體方位分佈極圖 . . . . .                             | 46 |
| 圖 24 晶體塑性模型 RVE 設置 . . . . .                                                                             | 47 |
| 圖 25 四種時效條件實驗量測與模型預測之降伏強度分析 . . . . .                                                                    | 48 |
| 圖 26 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之實驗與模擬應力應變曲線 . . . . .                          | 50 |
| 圖 27 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之差排密度演化曲線 . . . . .                             | 51 |
| 圖 28 不同溫度下模擬結果分析 (a) 降伏強度分析 (b)150°C、(c)200°C、(d)250°C 單軸拉伸之加工硬化分析 . . . . .                             | 52 |
| 圖 29 S 模型與 NS 模型模擬結果比較 (a) 加工硬化曲線 (b) 固溶、析出強化效應 . . . . .                                                | 53 |
| 圖 30 晶體塑性模型於 6111-T6 鋁合金於各時效條件之常溫與升溫拉伸預測能力驗證 . . . . .                                                   | 54 |
| 圖 31 資料集 $R$ 之 (a) 應變、(b) 應力、(c) 模型輸入、(d) 模型輸出 . . . . .                                                 | 58 |
| 圖 32 資料集 $S$ 之 (a) 應變、(b) 應力、(c) 模型輸入、(d) 模型輸出 . . . . .                                                 | 58 |
| 圖 33 模型在各種超參數組合下之預測性能 (a-c) 訓練資料集 (d-f) 驗證資料集 (g-i) 測試資料集 . . . . .                                      | 61 |
| 圖 34 驗證資料集中模型預測之最佳與最差結果 (a-b) 資料集 $S$ (c-d) 資料集 $R$ (e) 預測誤差隨時間序列之關係 . . . . .                           | 63 |
| 圖 35 測試資料集中模型預測結果 (a) 單軸拉伸 (b) 簡單剪切變形 . . . . .                                                          | 64 |
| 圖 36 簡單剪切變形中各應力分量之模型預測結果 . . . . .                                                                       | 64 |
| 圖 37 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架單元素驗證結果 . . . . .                                                           | 66 |

|                                                                                    |    |
|------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 圖 38 懸臂樑彎曲模擬結果 (a) 模型尺寸與邊界條件配置 (b) Von Mises 應力 (c) z 方向柯西應力分量 (d) 收斂性分析 . . . . . | 68 |
| 圖 39 狗骨頭單軸拉伸模擬結果 (a) 模型尺寸與邊界條件配置 (b) y 方向柯西應力分量 (c) 收斂性分析 . . . . .                | 70 |





## 表目錄

|                                       |    |
|---------------------------------------|----|
| 表 1 降伏強度模型參數整理 . . . . .              | 20 |
| 表 2 式 2.41 中之係數整理 [4] . . . . .       | 23 |
| 表 3 6111 鋁合金成分 . . . . .              | 37 |
| 表 4 TEM 分析析出物參數統整 . . . . .           | 41 |
| 表 5 晶體塑性模型 Orowan 析出物相關參數整理 . . . . . | 46 |
| 表 6 常溫拉伸分析中加工硬化模型相關參數整理 . . . . .     | 49 |
| 表 7 升溫拉伸分析中加工硬化模型相關參數整理 . . . . .     | 51 |
| 表 8 訓練參數整理 . . . . .                  | 59 |
| 表 9 多尺度模擬計算效率 . . . . .               | 71 |



# 第一章 緒論

## 1.1 研究背景

近年來隨著電動車產業的快速發展，對於高強度輕量金屬的需求快速增加，其中，鋁合金具有優異的比強度性質，因此在電動車產業中受到高度的重視。相對於鋼鐵，時效硬化型鋁合金在經過適當的時效熱處理後具有一定的強度並且擁有較輕的重量，因此被廣泛的應用於汽車結構構件中。然而，鋁合金在常溫下的成型性普遍不如鋼鐵以及成形後有回彈問題，因此製程中常以中溫、高溫加工增加鋁合金的延展性並降低回彈效應，使其能夠符合汽車構件中複雜的幾何需求。為了改善現有鋁合金的時效熱處理製程以及發展先進的成型加工技術，針對鋁合金製造鏈的完整研究為核心角色。

欲有系統性的分析鋁合金製程、結構、性質與性能 (process-structure-property-performance, PSPP) 間的關係以及配合實驗的交互驗證，以鋁合金成型模擬為例，如圖 1，集成計算材料工程 (integrated computational materials engineering, ICME) 架構探討熱處理製程的參數如何控制材料的微結構、材料的微結構如何影響材料的機械性質，以及最後影響到在複雜幾何與變形條件下工程構件的性能表現。其中，PSPP 關係主要可以分為三個部分來探討，如圖 2，一是透過製程模擬 (process simulation) 獲取在特定製程條件下材料顯微結構的相關參數；二是根據顯微結構參數構建材料模型 (materials model) 得到材料性質；最後則是根據其材料性質進行工程尺度的結構分析 (structural analysis)，而將其進行整合性的探討則稱之為多尺度材料模擬 (multiscale material simulation)。

多尺度材料模擬主要會涉及兩個或是兩個以上的尺度的邊界值問題 (boundary

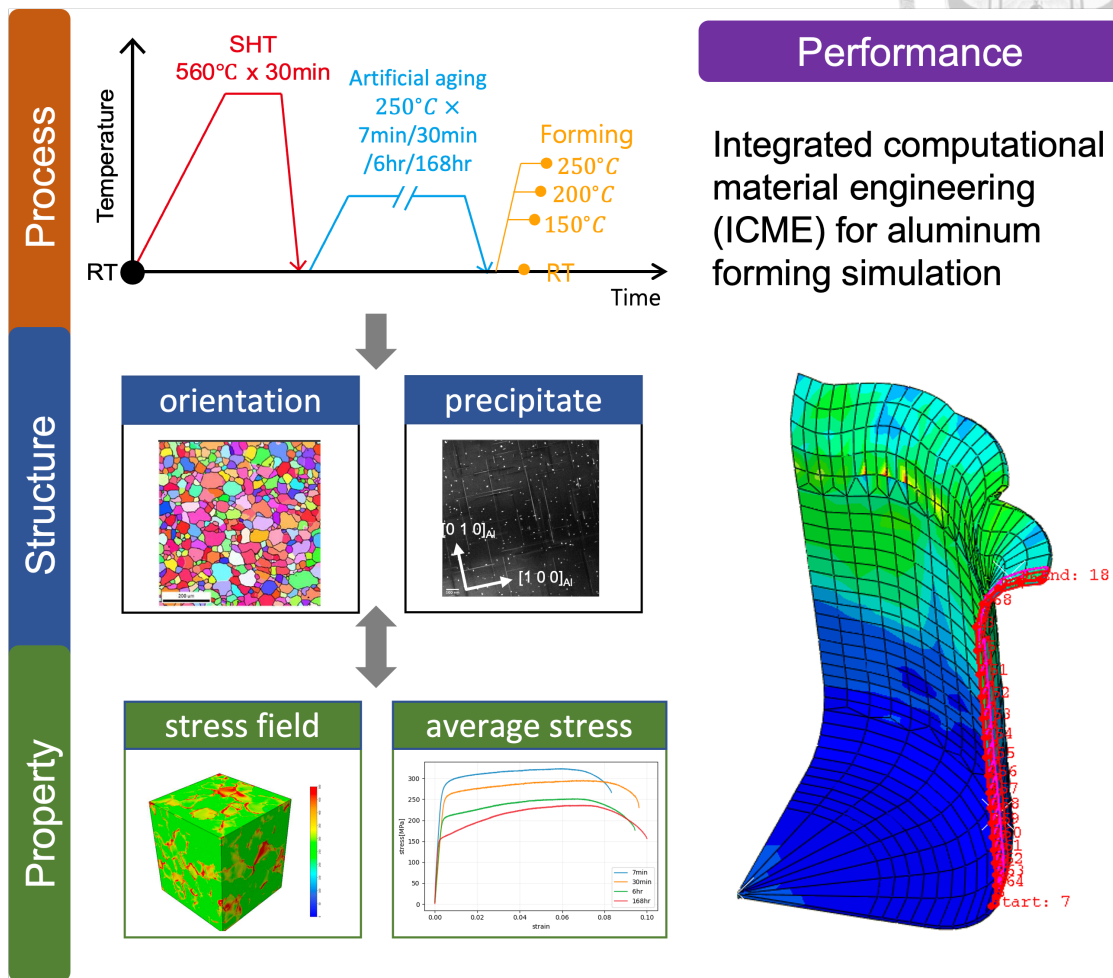


圖 1 集成計算材料工程 (ICME) 架構應用於探討鋁合金成型模擬之 PSPP 關係

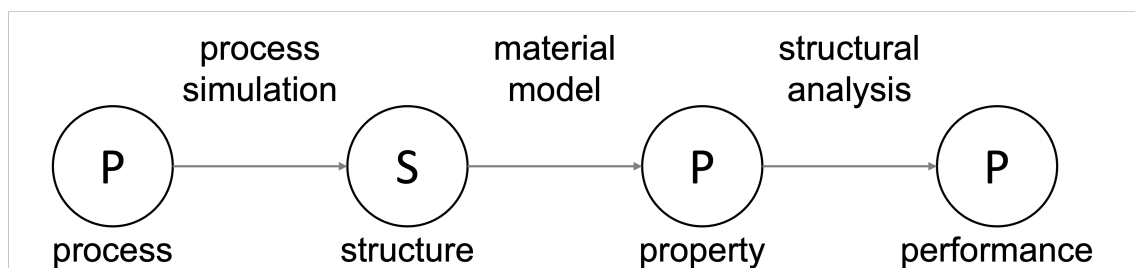


圖 2 PSPP 關係圖與計算方法 [1]

value problem, BVP)，以兩個尺度為例，如圖 3(a) 所示，為巨觀的結構分析以及微觀的材料模型迭代過程，微觀的材料模型通常假設具有週期性的特性並具有足夠的大小，稱為代表性體積元素 (representative volume element, RVE)。RVE 透過均質化過程 (homogenization process)，產生材料點上未知的應力應變關係，其過程為，將巨觀材料點上的應變  $\bar{\epsilon}$  作為邊界條件，求解邊界值問題得到 RVE 平均的應力響應  $\bar{\sigma}$  以及等效正切勁度矩陣  $\bar{C}$ ，接著將解得的材料響應回傳巨觀材料點，並進入下一個巨觀材料點進行迭代求解巨觀的邊界值問題，得到巨觀結構的應力應變分析結果。

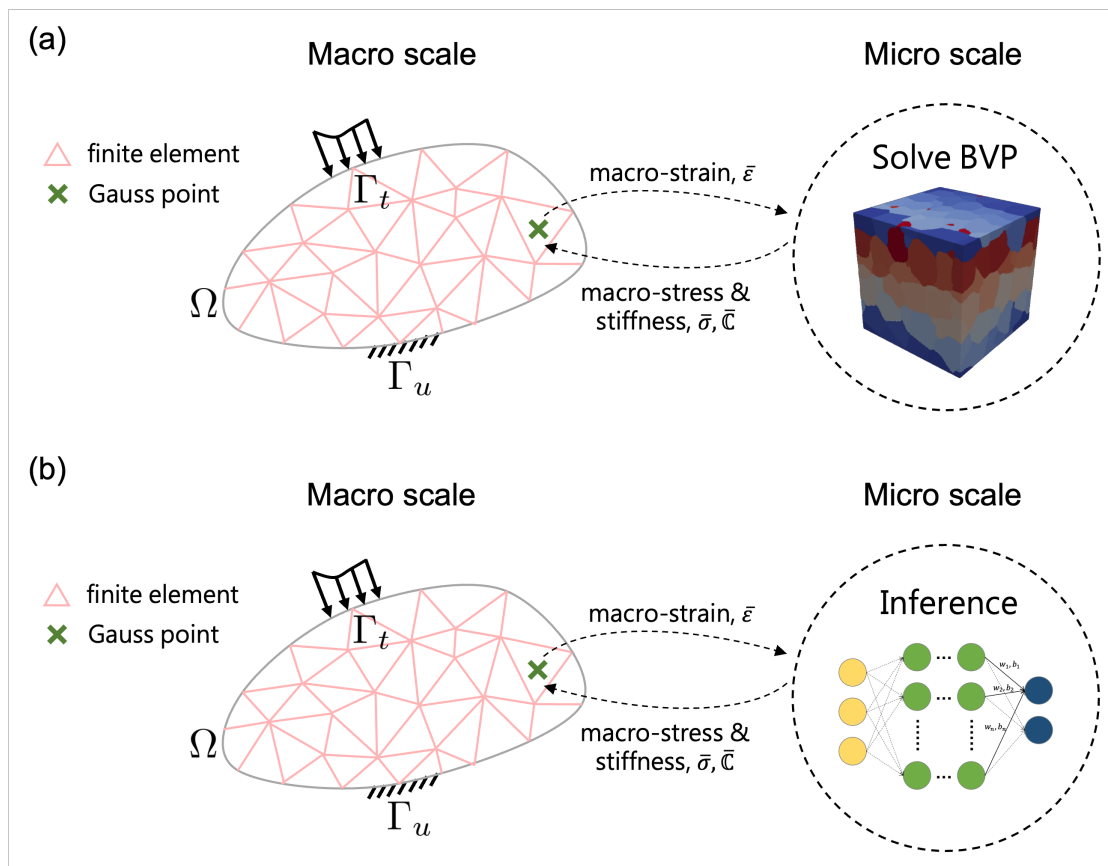


圖 3 以 (a)DNS、(b) 代理材料模型進行多尺度材料模擬之迭代過程示意圖

多尺度材料模擬中，以材料模型尤為重要，材料模型以介觀尺度出發向下可以連結製程模擬，在加工過程中動態的考量微結構的變化並即時的反應至材料的性質；向上則可以連結結構分析，在工程構件中計算材料點的應力應變並及時的

更新微結構對應的演化。傳統上多尺度材料模擬以直接數值模擬 (direct numerical simulation, DNS) 求解邊界值問題，如有限元素法、快速傅立葉法等，找出特定顯微結構的材料性質並連結巨觀的工程構件進行結構分析。然而，DNS 需精確的描述微結構的物理參數與幾何形狀，並使用足夠的解析度才能保有模擬結果的擬真度，其龐大的計算成本大幅度的限制了多尺度材料模擬在工程尺度中的應用。

近年來，基於機器學習的類神經網路 (artificial neural network, ANN) 快速發展，其透過大量的資料學習輸入與輸出之間的非線性關係，而經過適當訓練後的 ANN 模型能夠在保有精準度下具有極高的線上推論速度。因此，為了降低以多尺度材料模擬中高昂的計算成本，目前的研究發展主要以 DNS 材料模型產生訓練資料訓練 ANN 代理材料模型 (surrogate material model)，而後將訓練完畢的代理材料模型替代 DNS 材料模型進行高效率的多尺度材料模擬，稱之為數據驅動多尺度材料模擬 (data-driven multiscale material simulation, DDMS)，如圖 3(b)。然而，代理材料模型基於材料模擬產生資料進行訓練，對於資料的品質以及數量具有極高的要求，此外，代理材料模型並不遵守物理法則，若未進行適當的訓練會造成預測結果與真實材料行為不符。因此，如何利用有限的訓練資料準確的捕捉材料行為，以及如何有效的提升代理材料模型的泛用性、外推性以及參數的可解釋性皆為目前需要深入探討的研究議題。

## 1.2 文獻回顧

### 1.2.1 晶體塑性模型

欲進行數據驅動多尺度材料模擬，必須先建立 DNS 材料模型產生高擬真度的訓練資料。晶體塑性 (crystal plasticity) 模型從介觀尺度出發詮釋金屬的塑性行為，是目前常用的多尺度模擬方法。金屬材料塑性變形機制主要有差排滑移 (dislocation slip)，雙晶變形 (mechanical twinning) 與應力誘發相變態 (stress induced



phase transformation)[7]。其中，大多數金屬材料的主要塑性來源為差排滑移，因此最早的晶體塑性模型即是考慮單晶差排滑移至塑性行為的材料模型 [8]。其以基於  $\tanh$  函數的經驗公式描述塑性變形中因差排累積造成的硬化行為，稱為現象組成律模型。然而，雖然現象組成律模型在大多數情況下均能夠捕捉到材料硬化的宏觀趨勢，其硬化模型中並無包含微結構相關的材料參數，無法解釋材料硬化的微觀機制。因此，近年來基於微觀物理參數的組成律模型逐漸被提出，稱為物理組成律模型，其中以 Taylor 差排模型 [9] 以及 Kocks-Mecking 差排演化模型 (K-M 模型)[10] 最具代表性。Taylor 差排模型建立了描述差排密度與降伏強度關係的方程式；K-M 模型則是提出了差排密度隨著塑性變形增生、動態回復的演化方程式。為了更進一步的描述塑性變形中因應變相容性產生的幾何必要差排密度 (geometrically necessary dislocation density, GND)，針對 6000 系鋁合金，Myhr 等人 [11] 以差排平均滑移距離建立了 GND 對塑性應變的微分方程式。

在多晶材料的計算模擬中，早期常以 Sachs、Taylor[9] 等均值化方法簡化邊界條件加速運算，然而，其簡化的假設忽略了部分物理。以 Taylor 均值化方法為例，其假設晶粒均有相同的應變量，在計算時不須建立複雜的多晶幾何，然而卻無法滿足晶粒間的應力平衡條件。為了更嚴謹的描述晶粒間的交互作用，有限元素法被導入至晶體塑性模型中，簡稱晶體塑性有限元素法 (crystal plasticity finite element method, CPFEM)。其將單晶的材料行為寫入有限元素的積分點上，數個元素組成一顆單晶，再由數個單晶組合建置多晶模型。多晶模型考慮多晶的方向分布、晶粒尺寸，然而，受限於計算資源，通常此多晶模型尺度大約落在數百微米，屬於介觀尺度，無法直接在巨觀尺度上做計算。因此，在計算上將此多晶模型視為一材料點，而此材料點必須是一個 RVE，再經過適當均質化的假設後，轉化為材料模型所需的參數。如圖 4 所示，CPFEM 從微觀變形機制描述塑性變形，不再只是根據現象描述應力應變關係，更包含了微觀多晶結構的變化，除了可以

捕捉金屬材料的非等向塑性行為，還能夠提供晶粒受力時的變形歷程，因此被廣泛應用在金屬加工模擬分析中。其中最常被應用於拉伸、軋延對於金屬織構的演變 (texture evolution)、降伏面 (yield surface) 的預測、成型性 (formability) 模擬分析等。

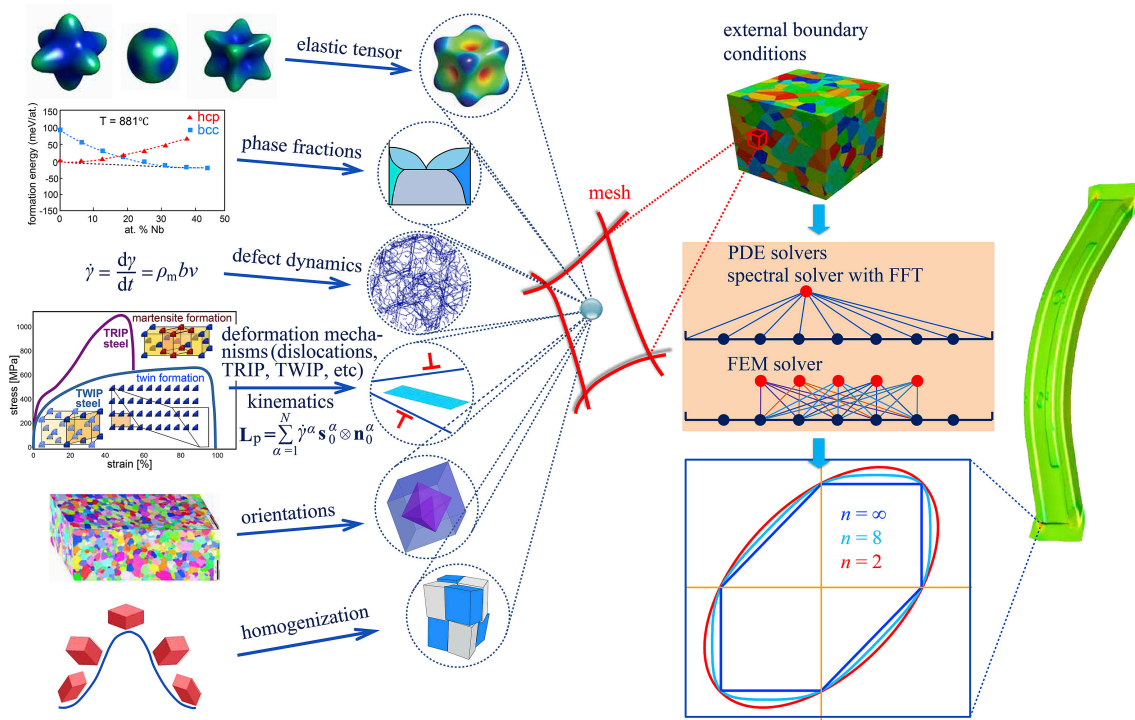


圖 4 晶體塑性模型連結微觀機制與材料性質之架構圖 [2]

近年來已有許多軟體可以用於進行晶體塑性 DNS 計算，例如有限元軟體 Abaqus[12]，其提供了自定義材料組成率的使用者副程式介面 UMAT；另外也有基於快速傅立葉轉換 (fast Fourier transform, FFT) 的 DAMASK[13]，主要針對金屬材料，相較於 CPFEM，CPFFT 雖具有週期性邊界條件以及模擬幾何結構上的限制，但能夠大幅提升運算效率。

### 1.2.2 多尺度材料模擬

時效硬化型鋁合金強度貢獻主要源自於析出物能夠有效的阻擋差排滑移，因此在製程中控制以及在產品階段掌握析出物的狀態相當重要。Myhr 等人提出了基於有限差分法的析出動力模型 (precipitation kinetics model)[5]，其透過將析出物粒





徑分佈 (particle size distribution, PSD) 分為離散的控制區間，以控制區間之間的流動速率描述 PSD 在非等溫時效下的演變。該團隊後續亦將析出動力模型結合晶體塑性模型，在模擬中能夠動態更新析出物的各項參數 [14]。另一方面，Han 等人 [15] 則提出了整合 Abaqus-DAMASK 的多尺度材料模擬架構，透過 Abaqus 進行巨觀結構分析，每一個巨觀有限元素積分點中則透過 UMAT 介面連接 DAMASK 進行微觀材料模型模擬。然而，該架構隨著巨觀積分點數量增加，微觀材料模型的數量亦隨之增加，計算成本隨著分析尺度指數成長，因此昂貴的計算成本仍大幅的限制了其運用於工業級尺度模擬的可行性。

### 1.2.3 數據驅動多尺度材料模擬

為了解決計算成本問題，微觀材料模型的運算效率為重要因素，使用機器學習技術訓練代理材料模型也成為了熱門研究領域。代理材料模型的核心目標為學習材料的輸入 (如應變) 與輸出 (如應力) 間的關係，除了如何準確的捕捉材料應力應變關係之外，模型的泛用性、外推性以及參數的可解釋性為評估代理材料模型的重要指標。

代理材料模型發展前期，研究通常直接以大量訓練資料進行訓練，針對單軸拉伸、簡單剪切等變形，經適當訓練後的全連接神經網路 (fully connected neural network, FNN) 能夠根據給定的應變準確的預測材料的應力響應以及材料的纖構 (texture) 演變 [16, 17]。針對材料塑性變形等較為路徑相依 (path-dependent) 變形行為，循環神經網路 (recurrent neural network, RNN) 透過模型架構中的記憶機制，能夠有效的提升代理材料模型的預測力，並且將模型的應用擴展至隨時間往任一方向隨機變化的複雜應變 [18]。此外，為了增加代理材料模型在訓練資料集以外的泛用推理能力，物理導引神經網路 (physic-informed neural network, PINN) 在訓練過程中，透過於損失函數中增加正則化項等方式，使模型的預測遵守物理法則以



及降低所需的訓練資料數量 [19]。Bonatti 等人則更進一步的提出新的 RNN 模型架構，在保證模型預測性能下，將 RNN 中所需要的記憶相關參數減至最小 [20]。此外，Bonatti 等人 [21] 與 Liu 等人 [22] 經過一系列的推導分別提出基於 RNN 以及結合 FNN 與 PCA 的代理材料模型架構，並且透過 Abaqus 使用者副程式介面串接代理材料模型進行巨觀的結構分析。然而，其串接巨觀結構分析的使用者副程式介面仍須包含大量的程式撰寫，其中包含在 Abaqus UMAT 中以 Fortran 程式語言重新撰寫神經網路，大幅的限制了數據驅動多尺度模擬的開發速度。

### 1.3 研究目的

總結前段小節所述，針對 6111 高強度鋁合金材料，溫度是影響析出物強化機制的重要因素，另外，欲探討材料微結構、性質與性能之關係，目前仍缺少數據驅動多尺度材料模擬的泛用架構。有鑑於此，本研究目的為發展結合析出物動力之晶體塑性模型，以及建立一泛用的數據驅動多尺度材料模擬平台，前者針對高強度鋁合金在不同時效熱處理製程、不同成型溫度條件下進行探討與實驗驗證，並產生資料提供基於機器學習的代理材料模型進行訓練；後者則透過 Abaqus UMAT 介面以及 Pytorch 機器學習框架的整合，將於 Pytorch 環境訓練完畢的代理材料模型快速的部署至 Abaqus 進行多尺度材料模擬，串連材料微結構、性質與性能之關係，並大幅的提升運算效率，深化多尺度材料模擬於工程尺度的應用價值。

### 1.4 論文架構

本論文架構分為五個章節，第一章節為緒論，介紹多尺度模擬研究背景、研究動機與目的，回顧晶體塑性模型與多尺度模擬之發展現況，以及提出代理材料模型之發展方向與數據驅動多尺度模擬的重要性。第二章節為理論與方法，首先說明晶體塑性理論以及鋁合金系統中的各項強化效應，接著介紹析出動力模型之



成核、成長與粗化方程式，以及於 DAMASK 中的實作方法。最後，簡介深度學習方法以及本研究使用的模型架構，並總結晶體塑性模型與數據驅動多尺度材料模型之計算流程。第三章節針對不同時效條件下的鋁合金，以本研究實作之晶體塑性模型與析出動力模型進行模擬與實驗驗證，探討析出物隨時效時間的狀態演變以及常溫、升溫拉伸下的降伏強度與加工硬化行為。第四章節討論訓練資料集的產生，以及代理材料模型的訓練結果與泛用性測試。隨後針對懸臂樑彎曲以及狗骨頭單軸拉伸進行數據驅動多尺度材料模擬，並探討其運算效率。第五章節總結本研究之研究成果與貢獻，並且提出未來可能的延伸方向。



## 第二章 理論與方法

本章節分為兩個小節介紹數多尺度材料模擬與據驅動多尺度材料模擬架構，第一小節介紹包含晶體塑性理論、基於差排密度的物理組成率模型以及溫度對於降伏強度與析出物動力之影響，隨後則介紹如何將實驗的穿透式電子顯微鏡 TEM 影像以及電子背向散射繞射 EBSD 進行前處理，以及如何透過 DAMASK 新增使用者自定義的材料組成律，建立晶體塑性 DNS 模型。接著，於第二小節說明深度學習方法以及本研究中使用的代理材料模型架構，最後介紹如何建立數據驅動多尺度材料模擬平台。

### 2.1 多尺度材料模型

大多數金屬材料主要的塑性變形機制為差排滑移，根據不同的晶體結構差排會沿著特定的滑移面以及滑移方向移動，稱為滑移系統，如面心立方 (face centered cubic, FCC) 晶體結構中具有 12 組差排滑移系統。材料受到變形時，滑移面上的差排受到的分解剪應力 (resolved shear stress, RSS) 可以根據 Schmid's law 表示：

$$\tau_{RSS} = \sigma_{ij} s_i m_j \quad (2.1)$$

其中  $\sigma$  為應力； $s$  和  $m$  則分別為滑移方向以及滑移面法向量；Schimid's factor 則為  $s_i m_j$ 。啟動滑移系統所需的剪應力則稱為臨界分解剪應力 (critical resolved shear stress, CRSS)，一般來說滑移沿著 Schmid's factor 最大的滑移系統啟動，然而，多晶金屬中不同晶體方向分佈組成的纖構 (texture) 使得滑移系統無法以 Schmid's factor 最大的滑移系統啟動，導致複雜的異向性變形行為。因此，晶體塑性模型由單晶出發，再經由數個材料點的單晶模型組成多晶模型，進而捕捉不同晶體方向

分佈的織構(texture)導致的異向性行為。



### 2.1.1 晶體塑性理論

考量大變形下，晶體的變形可以由變形梯度  $F$  來表示，變形梯度可以分解為彈性變形梯度  $F^*$ ，以及塑性變形梯度  $F^p$ ：

$$F_{ij} = F_{ik}^* F_{kj}^p \quad (2.2)$$

其中，如圖 5 所示，原座標系先經由塑性變形梯度  $F^p$  轉換至僅包含塑性變形的塑性座標系，考量因差排滑移造成的晶格剪變，而後經由彈性變形梯度  $F^*$  轉換至變形座標系。

將式 2.2 微分後則可得到速度梯度：

$$L_{ij} = L_{ij}^* + L_{ij}^p \quad (2.3)$$

其中定義彈性速度梯度  $L_{ij}^* = \dot{F}_{ik}^* F_{kj}^{*-1}$ ，以及塑性速度梯度  $L_{ij}^p = F_{ik}^* \dot{F}_{kl}^p F_{lm}^{p-1} F_{mj}^{*-1}$ 。

此外，晶體中不同滑移系統的塑性速度梯度總和則可表示為：

$$L_{ij}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{sl}} \dot{\gamma}^{\alpha} s_i^{*\alpha} m_j^{*\alpha} \quad (2.4)$$

其中  $N_{sl}$  為滑移系統總數； $\alpha$  代表滑移系統，如 FCC 晶體中  $N_{sl} = 12$ ，因此  $\alpha = 1, 2, \dots, 12$ ， $\dot{\gamma}^{\alpha}$  為第  $\alpha$  組滑移系統的剪應變率； $s_i^{*\alpha}$  以及  $m_j^{*\alpha}$  則分別代表第  $\alpha$  組滑移系統的滑移方向以及滑移面法向量：

$$s_i^{*\alpha} = F_{ik}^* s_k^{\alpha} \quad (2.5)$$

$$m_i^{*\alpha} = m_k^{\alpha} F_{ki}^{*-1} \quad (2.6)$$

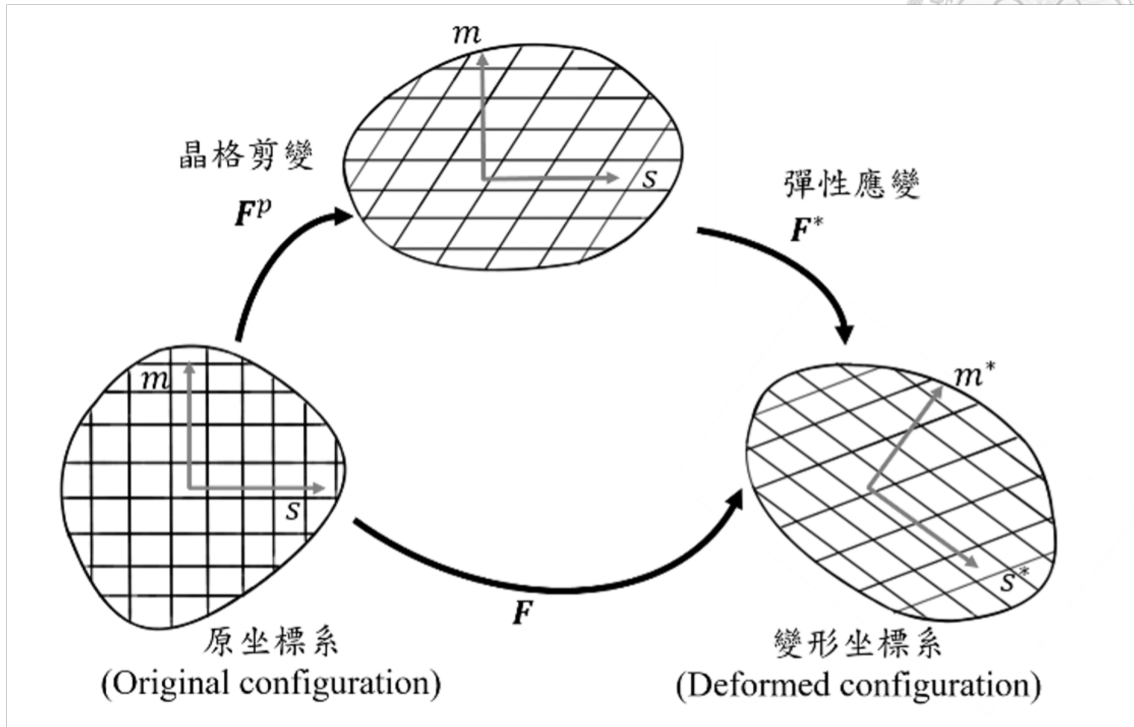


圖 5 晶體變形座標系轉換 [3]

## 塑性流法則

材料的塑性變形行為由塑性流法則以及硬化法則控制，塑性流法則描述塑性變形時各組滑移系統受到的剪應變率，第  $\alpha$  組滑移系統受到的剪應變率可表示為：

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \text{sign}\left(\frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}}\right) \left(\frac{|\tau^{\alpha}|}{g^{\alpha}}\right)^m \quad (2.7)$$

其中  $\dot{\gamma}_0$  為初始剪應變速率； $\tau^{\alpha}$  為第  $\alpha$  組滑移系統之分解剪應力； $g^{\alpha}$  為第  $\alpha$  組滑移系統之阻力 (i.e., CRSS)； $m$  為應變速率敏感係數，其值越小則表示剪應變率對應變速率越不敏感； $\text{sign}(\cdot)$  函數則代表取其中變數之正負號。由於  $\dot{\gamma}_0$  以及  $g^{\alpha}$  皆大於零，因此式2.7中第  $\alpha$  組滑移系統之剪應變速率方向由分解剪應力方向主導。此外，由於  $m$  值通常大於 10，因此  $|\tau^{\alpha}| < g^{\alpha}$  時  $\dot{\gamma}^{\alpha}$  趨近於零，滑移系統不啟動；而當  $|\tau^{\alpha}| > g^{\alpha}$  時  $\dot{\gamma}^{\alpha}$  大於零，滑移系統啟動。

## 硬化法則

滑移系統啟動後，差排密度開始累積，差排間平均滑移距離縮短造成滑移系統的阻力增加，因此差排需要受到更大的分解剪應力才能繼續滑移，稱為加工硬化，其中差排系統間亦會互相影響，稱為自硬化 (self hardening) 以及潛在硬化 (latent hardening)。滑移系統的阻力  $g^\alpha$  依照硬化法則更新：

$$g^\alpha = \tau_0 + \int \dot{g}^\alpha \quad (2.8)$$

其中  $\tau_0$  為在滑移系統尚未啟動時的 CRSS； $\dot{g}^\alpha$  為滑移系統阻力隨時間的變化率，可寫為：

$$\dot{g}^\alpha = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \quad (2.9)$$

其中  $h_{\alpha\beta}$  為硬化模數，下標  $\alpha$ 、 $\beta$  代表滑移系統，當  $\alpha = \beta$  時為自硬化， $\alpha \neq \beta$  時則為潛在硬化。根據 Roters 等人 [23]，自硬化和潛在硬化的關係由硬化矩陣  $q_{\alpha\beta}$  控制，寫為：

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} h(\bar{\gamma}) \quad (2.10)$$

其中， $\bar{\gamma} = \int \sum |\dot{\gamma}^\alpha| dt$  為總滑移量，而硬化矩陣為：

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 1 \sim 1.4 & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (2.11)$$

### 2.1.2 材料組成律

根據 Bishop 等人 [24]，滑移系統的阻力  $g^\alpha$  與降伏強度  $\sigma_y$  間可透過 Taylor factor  $M$  轉換：

$$g^\alpha = \frac{\sigma_y}{M} \quad (2.12)$$



而鋁合金的降伏強度由強化機制的疊加組成 [25](圖 6)：

$$\sigma_y = \sigma_i + \sigma_s + (\sigma_p^n + \sigma_d^n)^{\frac{1}{n}} \quad (2.13)$$

其中  $\sigma_i$  為純鋁的強度，其值約等於 10MPa； $\sigma_s$  為固溶強化效應； $\sigma_p$  為析出物強化效應； $\sigma_d$  則為加工硬化效應。各項強化機制可以分為降伏強度模型 (i.e.,  $\sigma_d = 0$ )，以及加工硬化模型 (i.e.,  $\sigma_d \neq 0$ ) 分別討論，如圖 6。

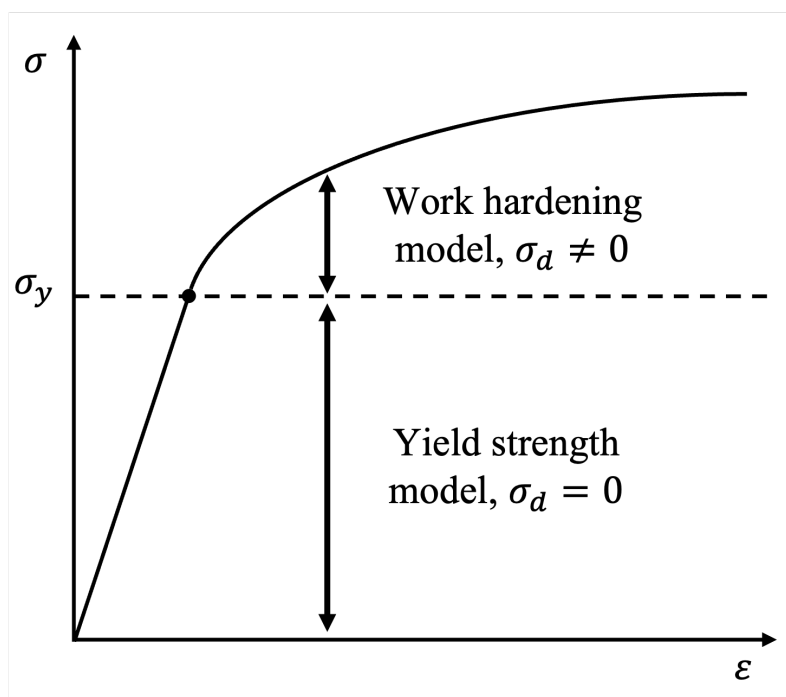


圖 6 材料降伏強度與加工硬化模型組成示意圖

## 降伏強度模型

### 固溶強化效應

固溶強化效應由合金系統中溶質原子周圍產生的應力場阻礙差排移動導致，其強度與溶質濃度有關，隨著時效熱處理的時間增加，溶質逐漸析出，因此固溶強化效應的強度貢獻逐漸降低。在 6111 鋁合金中，固溶強化效應主要由 Mg、Si、

Cu 三種元素貢獻 [4]，可寫為：

$$\sigma_s = \sum_i K_i C_i^{2/3} \quad (2.14)$$

其中  $C_i$  為溶質的濃度； $K_i$  為控制各溶質強化效應的控制因子。

### 析出物強化效應

析出物強化效應由析出物阻擋差排移動導致，其強度與析出物的形狀、大小等參數有關，在 6111 鋁合金中的析出物以針狀或板狀為主 [26]，析出物強化效應可由 Peach-Koehler 方程式描述 [4]：

$$\sigma_p = \frac{M\bar{F}}{b\bar{L}} \quad (2.15)$$

其中  $\bar{F}$  為平均析出物強度； $\bar{L}$  為析出物平均等效間距； $b$  則為 Burgers vector。若將式 2.15 中  $\bar{L}$  代換為析出物平均半徑  $\bar{r}$ ，則可寫為：

$$\sigma_p = \frac{M}{b\bar{r}} (2\beta\mu b^2)^{-1/2} \left(\frac{3f}{2\pi}\right)^{1/2} \bar{F}^{3/2} \quad (2.16)$$

其中  $f$  為析出物體積分率。析出物強度與析出物抵抗差排剪切的能力有關，當析出物半徑  $r$  小於臨界剪切半徑  $r_{trans}$  時，稱為可剪切析出物，遭遇差排時被差排剪切而過，析出物強度貢獻較小；反之，當  $r$  大於等於  $r_{trans}$  時，稱為不可剪切析出物，遭遇差排時差排以環繞方式通過，形成差排環 (Orowan loop)，析出物強度貢獻較大：

$$F = \begin{cases} 2\beta\mu b^2 \left(\frac{r}{r_{trans}}\right), & r < r_{trans} \\ 2\beta\mu b^2, & r \geq r_{trans} \end{cases} \quad (2.17)$$

其中  $\beta$  為差排張力常數，其值接近 0.5； $\mu$  為剪切模數。此處，為了在後續章節中





結合析出動力模型，析出物半徑被分為  $I$  個離散控制區間，因此  $\bar{F}$  表示為：

$$\bar{F} = \frac{\sum_{i=1}^I N_i F_i}{\sum_{i=1}^I N_i} \quad (2.18)$$

其中  $N$  為析出物數量密度。

#### 加工硬化效應

式2.13中的最後一項  $\sigma_d$  為塑性變形中差排密度增生所造成的加工硬化效應，其中，差排密度又可分為統計儲存差排密度 (statistically stored dislocations, SSD) $\rho_{ssd}$  以及幾何必要差排密度 (geometrically necessary dislocations, GND) $\rho_{gnd}$ ，兩者隨著塑性應變各自增長，而加工硬化效應對降伏強度的貢獻  $\sigma_d$  可寫為：

$$\sigma_d = \alpha M \mu b \sqrt{\rho_{ssd} + \rho_{gnd}} \quad (2.19)$$

其中， $\alpha$  為常數，其值約為 0.3。

SSD 遵守 Kocks-Mecking[10] 演化方程式，隨著塑性應變增長：

$$\frac{\partial \rho_{ssd}}{\partial \bar{\gamma}} = k_1 \sqrt{\rho_{ssd}} - k_2 \rho_{ssd} \quad (2.20)$$

其中， $k_1$  為常數，描述差排間交互作用的密度增長關係； $k_2$  為塑性變形中的差排動態回復項，其與鋁合金中 Mg 等效溶質濃度、溫度以及應變速率有關，其與溫度之關係可以藉由 Zener-Hollomon 參數  $Z$  描述：

$$k_2 = k_2^* \left[ 1 + \left( \frac{Z_s}{Z} \right)^{m_T} \right] \quad (2.21)$$

其中， $k_2^*$  為常溫下的差排動態回復參數； $Z_s$  以及  $m_T$  為常數。Zener-Hollomon 參

數  $Z$  可寫為：

$$Z = \dot{\epsilon}_p \exp\left(\frac{Q_v}{RT}\right) \quad (2.22)$$

其中  $\dot{\epsilon}_p$  為塑性應變率； $Q_v$  為活化能； $R$  為理想氣體常數。式2.22中當溫度下降時  $Z$  值隨指數增長，而常溫下  $Z \gg Z_s$ ，因此式2.21中  $k_2 \approx k_2^*$ ，結合 Myhr 等人 [27] 針對常溫下的差排動態回復進行校正可得：

$$k_2^* = k_1 \frac{\alpha M \mu b}{k_3 (\hat{C}_{Mg})^{3/4}} \quad (2.23)$$

其中  $k_3$  為控制因子，控制溶質濃度對差排動態回復的影響； $\hat{C}_{Mg}$  為鋁合金中 Mg 的等效溶質濃度，其考慮時效過程中 Mg 與 Si、Fe、Mn 等固溶元素形成析出物 [11]，造成濃度變化：

$$\hat{C}_{Mg} = C_{Mg} + 0.5C_{Si}^{eff} \quad (2.24)$$

$$C_{Si}^{eff} \approx C_{Si} - 0.33(C_{Fe} + C_{Mn}) \quad (2.25)$$

GND 為在產生塑性變形時，為了滿足變形相容性，在晶界、第二相析出物等邊界產生的差排累積。在含有不可剪切析出物的合金系統中，差排環繞通過不可剪切析出物形成的差排環即會造成 GND 的累積。根據 Myhr 等人 [14]，針對析出物周圍 GND 的累積效應可以用塑性滑移距離  $\lambda_g$  描述：

$$\lambda_g = \left( 8 \sum_{r=r_{trans}}^{r=\infty} r_i^2 N_i \right)^{-1} \quad (2.26)$$

然而，當析出物半徑大於但接近臨界半徑時 (i.e.,  $r \gtrsim r_{trans}$ )，原先環繞在不可剪切析出物周圍的差排環會隨著應力增加而逐漸變得不穩定，最終導致其仍能剪切通過析出物 [28]，因此  $\lambda_g$  需進行修正。此處額外定義一臨界半徑  $r_{cl}$ ，其析出物半徑足夠大，使得差排環隨著應力增加亦無法剪切通過析出物。而式2.26需進行修

正為等效塑性滑移距離  $\lambda_g^*$ ：

$$\lambda_g^* = \frac{\lambda_g}{\varphi} \quad (2.27)$$

其中  $\varphi$  為控制塑性滑移距離之參數，當  $r \leq r_{trans}$  時其值為 0， $\lambda_g^* = \infty$ ；而在  $r \geq r_{cl}$  時其值為 1， $\lambda_g^* = \lambda_g$ ；當  $r_{trans} < r < r_{cl}$  時  $\varphi$  則為：

$$\varphi = \frac{r - r_{trans}}{r_{cl} - r_{trans}} \quad (2.28)$$

因此隨著析出物半徑由  $r_{trans}$  逐漸增加至  $r_{cl}$ ， $\varphi$  值會隨之逐漸由 0 增加至 1，最後使得  $\lambda_g^* = \lambda_g$ 。與 SSD 相似，GND 的演化方程式由描述差排增長關係的常數  $k_{1g}$ ，以及差排動態回復項  $k_{2g}$  表示：

$$\frac{\partial \rho_{gnd}}{\partial \bar{\gamma}} = \frac{k_{1g}}{\lambda_g^*} - k_{2g} \rho_{gnd} \quad (2.29)$$

此處，GND 的演化方程式僅考慮析出物的貢獻，因此當合金系統中不包含不可剪切析出物時， $\lambda_g^* = \infty$ ，GND 演化速率為零，而其他如晶界造成的 GND 效應則無法由此方程式描述。與式 2.21 相似， $k_{2g}$  與溫度的關係由 Zener-Hollomon 參數  $Z$  描述：

$$k_{2g} = k_{2g}^r \left( \frac{f_o}{f_o^r} \right) \left[ 1 + \left( \frac{Z_g}{Z} \right)^{m_T} \right] \quad (2.30)$$

其中， $k_{2g}^r$  為差排動態回復常數； $f_o$  與  $f_o^r$  為不可剪切析出物的體積分率； $Z_g$  為常數；上標  $r$  代表該參數由文獻 [11] 中的參考合金進行實驗校正而得。

最後，由式 2.20 以及式 2.29 可推導得到式 2.10 中硬化模數  $h$  為：

$$\begin{aligned} h &= \frac{\partial \tau}{\partial \bar{\gamma}} = (\tau_p^n + \tau_d^n)^{\frac{1}{n}-1} \tau_d^{n-1} \frac{\partial \tau_d}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \bar{\gamma}} \\ &= (\tau_p^n + \tau_d^n)^{\frac{1}{n}-1} \tau_d^{n-1} \frac{\alpha \mu b}{2\sqrt{\rho_s + \rho_g}} \left( k_1 \sqrt{\rho_{ssd}} - k_2 \rho_{ssd} + \frac{k_{1g}}{\lambda_g^*} - k_{2g} \rho_{gnd} \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

其中  $\tau = \sigma/M$ 。

## 應變率與溫度效應

為了在降伏強度模型中將應變率以及溫度效應納入考量，Myhr 等人 [14] 根據 Orowan 方程式，將差排滑移速率與應變率、以及差排滑移通過析出物所需克服的 Gibbs 自由能  $\Delta G$  寫入方程式中：

$$\sigma_y = \hat{\sigma} \frac{\mu(T_r)}{\mu_0} \left\{ 1 - \left[ \frac{RT_r}{\Delta G} \ln \left( \frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}_p} \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} \quad (2.32)$$

其中， $\hat{\sigma}$  為 0K 下的降伏強度； $T_r$  為常溫 (i.e., 298K)； $\dot{\epsilon}_0$  為參考應變率；p 和 q 與析出物的空間分佈以及形狀有關，其範圍為  $0 \leq p \leq 1$ ，以及  $1 \leq q \leq 2$ ，而剪切模數與溫度的關係可表示為：

$$\mu = \mu_0 \left( 1 - \frac{T}{T_m} \exp \left( \theta_g \left( 1 - \frac{T_m}{T} \right) \right) \right) \quad (2.33)$$

其中為  $\mu_0$  溫度為 0K 時的剪切模數； $T$  為溫度； $T_m$  為材料的熔點； $\theta_g$  為材料常數。本節中之模型參數均統整於表 1 中。

### 2.1.3 析出動力模型

在鋁合金製程中，一般於固溶熱處理 (solid solution heat treatment, SHT) 後進行不同溫度的時效熱處理 (aging heat treatment)，將溶質析出形成析出物以提高降伏強度。析出物的形成過程主要分為三階段，包括成核 (nucleation)、成長 (growth) 以及粗化 (coarsening)。Myhr 等人提出基於 KWN 數值模型的析出動力模型 [4]，以有限差分法將析出物的粒徑分佈 (particle size distribution, PSD) 拆分為離散控制區間，並且整合析出物成核、成長以及粗化模型，以連續方程式耦合三者，計算時效熱處理過程中 PSD 的演變。

析出動力模型由三個部分組成，包括成核方程式、變化率方程式以及連續方



表 1 降伏強度模型參數整理

| Parameter                     | Value                  | Description                   |
|-------------------------------|------------------------|-------------------------------|
| $M$                           | 3                      | typical value in fcc material |
| $b(m)$                        | $0.286 \times 10^{-9}$ | magnitude of Burgers vector   |
| $r_{trans}(m)$                | $7.2 \times 10^{-9}$   | transition radius             |
| $r_{cl}(m)$                   | $25.0 \times 10^{-9}$  | from [28]                     |
| $\beta$                       | 0.48                   | constant close to 0.5[4]      |
| $\alpha$                      | 0.3                    | from [14]                     |
| $k_1(m^{-1})$                 | $4.0 \times 10^8$      | from [14]                     |
| $k_3(N/m^2wt\%^{3/4})$        | $2.0 \times 10^8$      | from [14]                     |
| $k_2^0$                       | 18.0                   | from [14]                     |
| $k_{1g}(m^{-1})$              | $4.0 \times 10^8$      | from [14]                     |
| $k_{2g}^0$                    | 20                     | from [14]                     |
| $Z_s(s^{-1})$                 | $1.0 \times 10^5$      | from [14]                     |
| $Z_g(s^{-1})$                 | $1.0 \times 10^8$      | from [14]                     |
| $m_T$                         | 1/3                    | from [14]                     |
| $f_o^r$                       | 0.0109                 | from [11]                     |
| $T_m(K)$                      | 923                    | melting temperature           |
| $\theta_g$                    | 2.295                  | from [14]                     |
| $\mu_0(Pa)$                   | $2.71 \times 10^{10}$  | shear modulus at 0K           |
| $R(kJ/mol)$                   | 8.314                  | ideal gas constant            |
| $\Delta G(kJ)$                | 300                    | Gibbs free energy[14]         |
| $\dot{\varepsilon}_0(s^{-1})$ | $1.0 \times 10^6$      | from [14]                     |
| $p$                           | 1                      | reasonable value [14]         |
| $q$                           | 1                      | reasonable value [14]         |

程式。成核方程式描述溶質元素由固溶態轉變為第二相析出物的成核速率  $j$  為：

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_{het}^*}{RT}\right) \exp\left(-\frac{Q_d}{RT}\right) \quad (2.34)$$

其中， $j_0$  為描述成核速率的常數； $Q_d$  為 Mg 的擴散活化能； $\Delta G_{het}^*$  為異質成核活化能，可表示為：

$$\Delta G_{het}^* = \frac{(A_0)^3}{(RT)^2 \left[ \ln\left(\frac{\bar{C}}{C_e}\right) \right]^2} \quad (2.35)$$

其中， $A_0$  為異質成核活化能相關參數； $\bar{C}$  為基體 (matrix) 中 Mg 的溶質濃度； $C_e$  為基體與析出相界面處 Mg 的平衡濃度。此處為了簡化計算，模型假設為 Al-Mg<sub>2</sub>Si 組成的二元系統，第二相的析出由 Mg 元素控制，並且合金系統中析出物均為球狀。因此藉由 Al-Mg<sub>2</sub>Si 相圖得到 Mg 的平衡濃度為：

$$C_e = C_s \exp\left(-\frac{Q_s}{RT}\right) \quad (2.36)$$

其中  $C_s$  為常數； $Q_s$  為 apparent solvus boundary enthalpy。變化率方程式描述時效熱處理過程中析出物的半徑變化率，當變化率為正值時代表析出物成長；反之，當變化率為負值時代表析出物溶解：

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{\bar{C} - C_i}{C_p - C_i} \frac{D}{r} \quad (2.37)$$

其中， $D$  為擴散係數； $C_p$  為析出相中 Mg 的濃度； $C_i$  為考慮 Gibbs-Thomson 效應後基體與析出相界面處 Mg 的平衡濃度，可表示為：

$$C_i = C_e \exp\left(\frac{2\sigma V_m}{rRT}\right) \quad (2.38)$$

其中， $\sigma$  為介面能； $V_m$  為粒子莫爾體積。由式2.37以及式2.38可以得到析出物成

長與溶解的臨界半徑：

$$r^* = \frac{2\sigma V_m}{rRT} \left( \ln \left( \frac{\bar{C}}{C_e} \right) \right)^{-1} \quad (2.39)$$

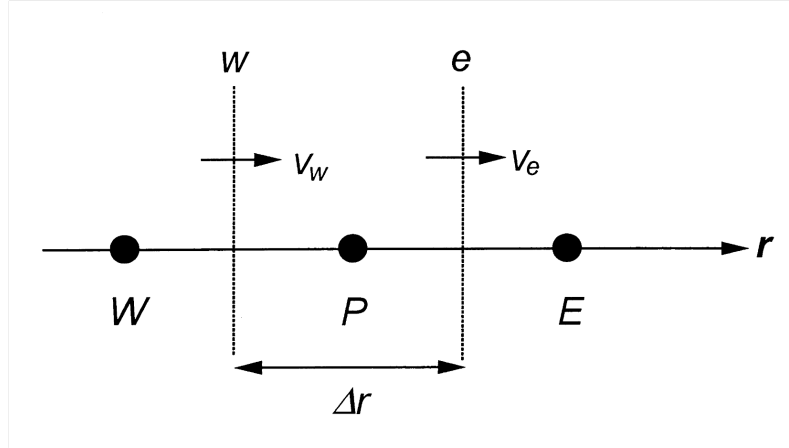


圖 7 有限差分法離散區間示意圖 [4]

為了計算析出物的粒徑分佈隨時間、溫度的演變關係，粒徑分佈被拆分為  $i$  個離散控制區間，每個控制區間的大小為  $\Delta r$  且單位體積內包含  $N_i$  個析出物。如圖 7 所示，邊界  $w$ 、 $e$  定義了粒徑控制區間  $\Delta r$ ， $v_w$  以及  $v_e$  則代表控制區間邊界上的粒子半徑變化率，其值可由式 2.37 計算而得。粒徑控制區間之間的流動平衡由連續方程式描述：

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial (Nv)}{\partial r} + S \quad (2.40)$$

其中， $N$  為  $\Delta r$  區間內粒子的數量密度； $S$  則是時間步增量  $\Delta t$  中粒子成核數量。忽略式 2.40 中成核數量項  $S$ ，並將等號兩側進行積分得到時間  $t + \Delta t$  中控制區間  $P$  中的粒子數量密度  $N_P$ ：

$$N_P = (a_E N_E + a_W N_W + a_P^0 N_P^0) / a_P \quad (2.41)$$

其中， $N_P^0$  為時間  $t$  中控制區間  $P$  中的粒子數量密度；此外為了計算方便，係數  $a_E$ 、 $a_w$ 、 $a_p$ 、 $a_p^0$  均整理於表 2。此外，考慮溶質的析出與溶解平衡，基體中 Mg

表 2 式2.41中之係數整理 [4]

|         | $v_e > 0, v_w > 0$            | $v_e > 0, v_w < 0$                  | $v_e < 0, v_w > 0$    | $v_e < 0, v_w < 0$            |
|---------|-------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|-------------------------------|
| $a_E$   | 0                             | 0                                   | $-v_e$                | $-v_e$                        |
| $a_W$   | $v_w$                         | 0                                   | $v_w$                 | 0                             |
| $a_p^0$ | $\Delta r / \Delta t$         | $\Delta r / \Delta t$               | $\Delta r / \Delta t$ | $\Delta r / \Delta t$         |
| $a_p$   | $(\Delta r / \Delta t) + v_e$ | $(\Delta r / \Delta t) + v_e - v_w$ | $\Delta r / \Delta t$ | $(\Delta r / \Delta t) - v_w$ |

的溶質濃度為：

$$\bar{C} = C_0 - (C_p - \bar{C}) \sum_i \frac{4}{3} \pi r_i^3 N_i \quad (2.42)$$

其中， $C_0$  為基體中 Mg 的初始溶質濃度。

以上析出動力模型的計算迭代流程彙整於圖 8 中，本節析出動力模型中的參數均取自文獻 [5]，詳細實作過程以及與晶體塑性模型的整合將於下一小節中進行介紹。

#### 2.1.4 參數設置及實作

目前常見用於開發晶體塑性模型的环境有商用軟體 Abaqus 以及由德國 Max-Planck 研究團隊提出的開源軟體 DAMASK[13]。其中 Abaqus 基於有限元素法進行求解，並且提供使用者材料副程式介面 UMAT 以進行自定義材料組成律開發，其中以黃永剛教授提供的單晶現象組成率開源程式碼最為知名 [29]，並且也被廣泛的作為二次開發的基礎架構；DAMASK 則基於快速傅立葉法進行求解，在求解上具有較高的運算效率，2021 年發表的 3.0 版本中進一步提出了一套完整的 python 前、後處理工具以及詳細的說明文件。考慮到本研究後續將以 DNS 模型作為代理材料模型之訓練資料集，對於運算效率有較大的需求，因此本研究將採用 DAMASK 作為開發環境。

#### 實驗微結構參數前處理

在 2.1.1 小節中，降伏強度模型以及析出動力模型考量合金系統中包含晶體方



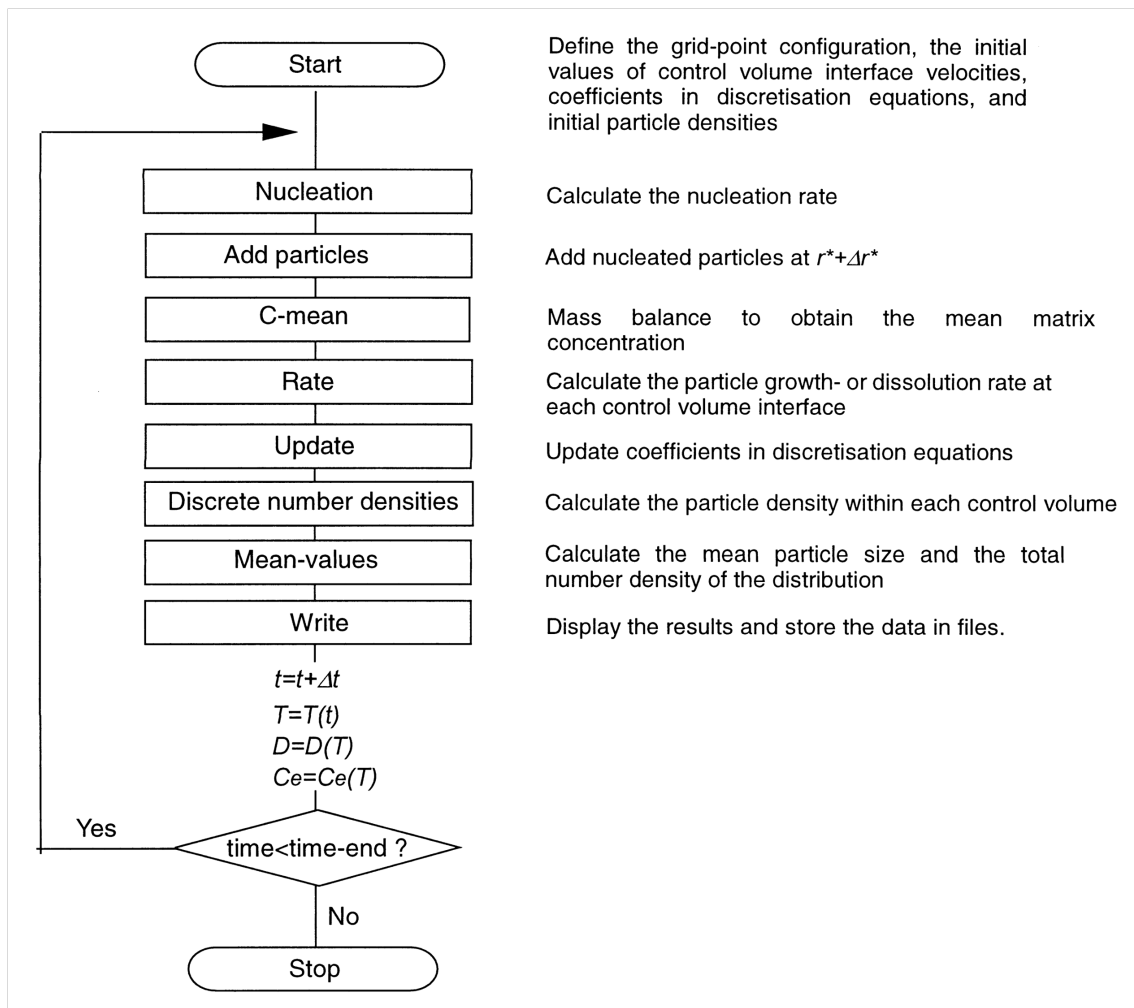


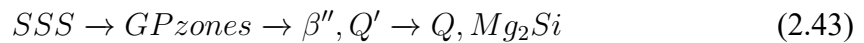
圖 8 析出動力模型迭代流程圖 [5]

向、第二相析出物、溶質濃度等關鍵物理參數來進行降伏強度、粒徑分佈的預測，因此本研究透過穿透式電子顯微鏡 (TEM) 以及背向散射電子繞射技術 (EBSD) 將微結構轉換為相關物理參數，代入晶體塑性模型中進行模擬。



### TEM 析出物分析

含 Cu 之 Al-Mg-Si 合金在時效熱處理製程中根據時效時間以及溫度條件，會形成一系列複雜的析出物，其化學組成、形貌各不相同，根據 Poole 等人 [26]，其析出物序列為：



其中  $\beta''$  為針狀析出物，其截面形狀呈圓形； $Q'$  以及  $Q$  則為板狀析出物，其截面形狀呈矩形，三者均隨著時效熱處理沿著  $\langle 100 \rangle$  方向生長。為了從 TEM 影像中分析析出物相關統計參數，本研究使用 Schneider 等人 [30] 發展的 ImageJ 影像辨識工具，並根據鄭翊良 [6] 提出的 ImageJ 影像處理方法進行析出物參數分析。

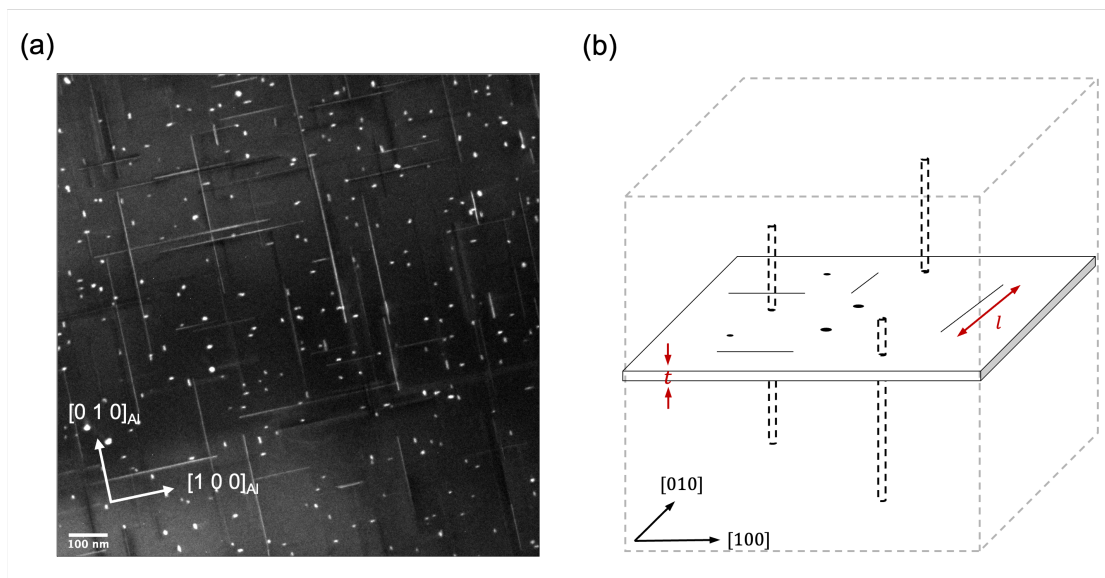


圖 9 TEM 影像分析與析出物參數計算。(a)TEM 暗場影像，(b)TEM 試片中析出物分佈示意圖

圖 9(a) 為 TEM 暗場影像，其中的白點為面向  $[001]$  方向，即垂直試片方向的

析出物，其數量  $n$  由統計白點的數量而得；白線則為  $[100]$  以及  $[010]$  方向平行於試片的析出物，統計其長度可得析出物平均長度  $\bar{l}$ 。假設析出物數量在  $\langle 100 \rangle$  三個方向中平均分佈，析出物的數量密度  $N$  為：

$$N = \frac{3n}{V} \quad (2.44)$$

其中  $V$  為 TEM 試片體積，然而由於  $\bar{l}$  通常大於試片厚度  $t$ ，如圖 9(b) 所示，因此 TEM 試片體積需進行修正：

$$V = A(t + \bar{l}) \quad (2.45)$$

最後，析出物體積分率  $f$  為：

$$f = N\pi\bar{r}^2\bar{l} \quad (2.46)$$

### EBSD 晶體方位分析

欲以晶體塑性模型分析真實材料變形行為時，為了建立符合真實材料微結構的代表體積元素 (representative volume element, RVE)，通常以實驗進行 EBSD 分析得到材料的晶體方位分佈函數 (orientation distribution function, ODF)，接著透過開源的建模軟體 DREAM.3D[31]，根據 RVE 幾何參數重建符合 ODF 的三維多晶結構。此外，DAMASK 也提供 python API 方便使用者快速的將 DREAM.3D 輸出的檔案轉換為 DAMASK 的輸入檔案格式。

晶體方位為經由全域座標旋轉而得，通常由歐拉角 (Euler angle) 或四元數 (Quaternions) 等方式表示，DAMASK 中則採用四元數描述晶體方位。四元數由一個實數和三個虛部組成：

$$q = w + xi + yj + zk \quad (2.47)$$

其中， $w, x, y, z$  為實數。若  $q$  為單位四元數，則亦可使用三維單位向量

$\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ ，以及旋轉角  $\theta$  表示：

$$q = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{u} \quad (2.48)$$

而線性變換  $L_q$  即代表以  $\mathbf{u}$  為旋轉軸，將任意三維向量  $\mathbf{x}$  逆時針旋轉  $\theta$  徑度：

$$L_q(\mathbf{x}) = q\mathbf{x}q^* \quad (2.49)$$

其中  $q^*$  為  $q$  的共軛。結合式2.48以及式2.49可得到羅德里格旋轉公式 (Rodrigues' rotation formula)，以矩陣形式表示為：

$$R_u(\theta) = \begin{bmatrix} u_1u_1v\theta + \cos\theta & u_1u_2v\theta - u_3\sin\theta & u_1u_3v\theta + u_2\sin\theta \\ u_1u_2v\theta + u_3\sin\theta & u_2u_2v\theta + \cos\theta & u_2u_3v\theta - u_1\sin\theta \\ u_1u_3v\theta - u_2\sin\theta & u_2u_3v\theta + u_1\sin\theta & u_3u_3v\theta + \cos\theta \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

其中  $v\theta = 1 - \cos\theta$ 。因此，晶體座標  $C_{crystal}$  與全域座標  $C_{global}$  之間的轉換關係 (圖 10) 可表示為：

$$C_{global} = R_u(\theta) C_{crystal} \quad (2.51)$$

在 DAMASK 中，晶體座標與全域座標之間的轉換於程式內部自動完成，因此使用者只需在材料參數中定義以單位四元數表示的晶體方位，即可完成座標轉換。

### 於 DAMASK 中自定義材料組成律

DAMASK 由 Fortran 程式語言進行編寫，其程式架構在尺度上以階層式結構設計堆疊而成，其中亦將每層的計算進行模組化，以方便進行後續維護或新增使用者定義函式。如圖 11所示，DAMASK 階層式結構可分為三個階層，分別為材料點模型 (material point model)、材料構件 (constituent) 以及材料組成律 (constitutive law)。其中，材料點模型由一個或多個材料構件組成，而材料構件中



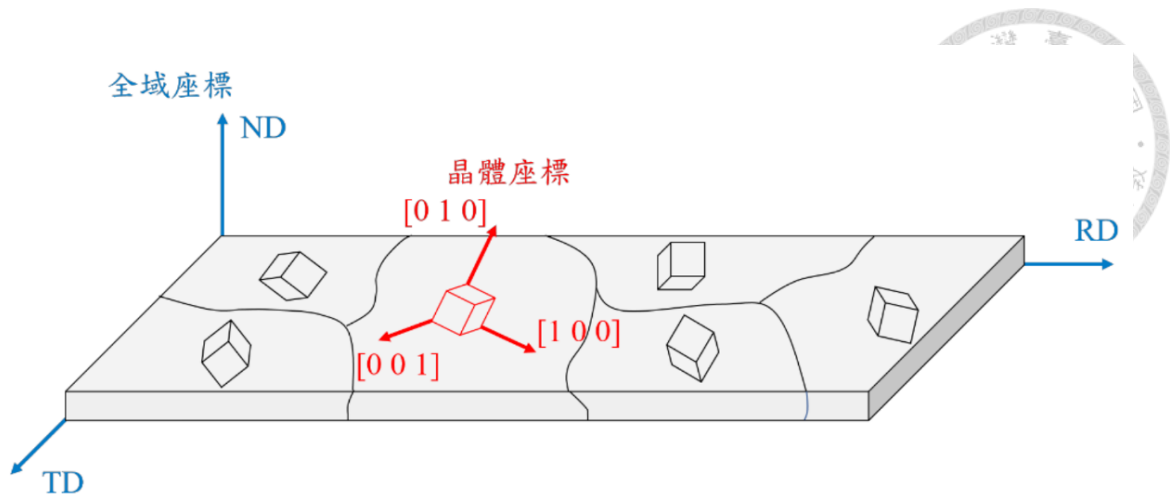
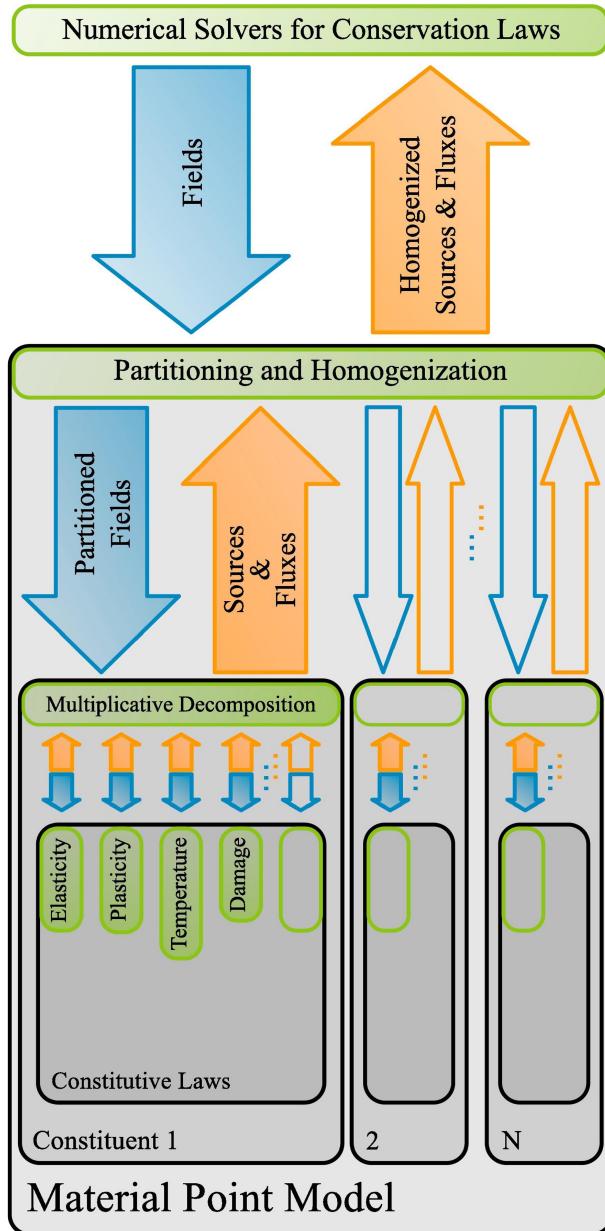


圖 10 全域座標與晶體座標示意圖 [6]

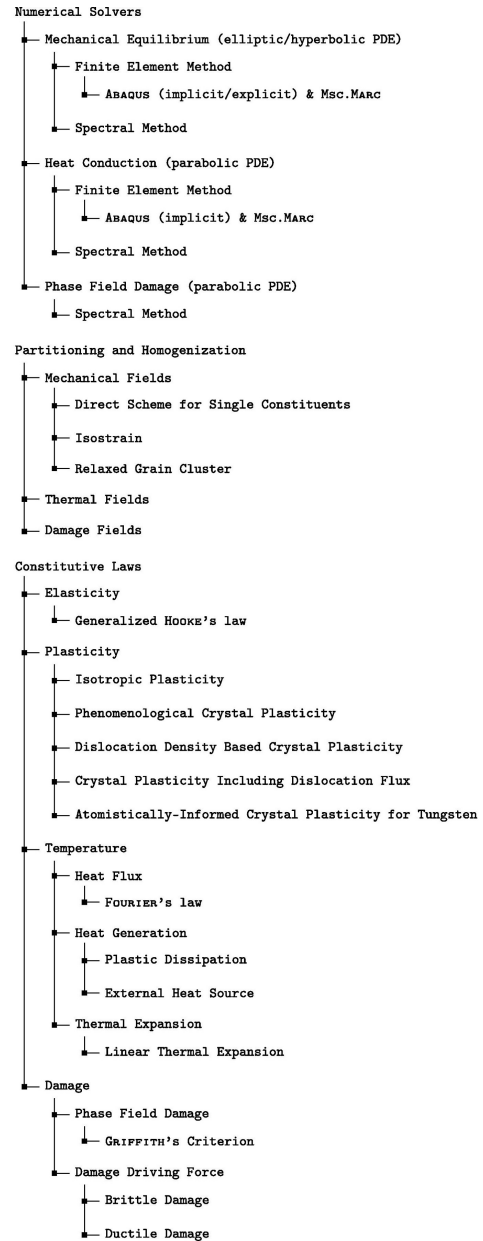
則由材料組成律描述彈性、塑性等材料行為。

以分析材料機械性質為例，材料點模型根據系統的邊界條件以及力平衡方程式，將材料點變形分解 (partitioning) 至材料構件中，隨後回傳均值化 (homogenization) 應力響應。材料點模型根據應用場景以及計算需求，可以使用不同的均值化方法，以簡化計算，如 Taylor isostrain assumption[9]、relaxed grain cluster[32] 等方法常被用於大尺度沖壓模擬中預測金屬纖構的演變。然而，均值化方法基於簡化假設，忽略了部分物理行為，因此 DAMASK 亦提供直接求解方法 (本研究使用) 以進行貼近真實物理行為的模擬，該方法中一個材料點中只包含一個材料構件，因此無需進行均值化過程。材料構件連接材料點模型以及材料組成律，其根據式2.2進行變形梯度分解 (multiplicative decomposition)，並由材料組成律更新當前時間的材料狀態 (internal material state) 以及應力響應，隨後將結果回傳至材料點模型中。

DAMASK 在塑性變形模擬中預設提供了數種材料組成律，其中包括了現象組成律、基於差排密度的物理組成律等。由於 DAMASK 模組化的設計，若使用者欲新增自定義的材料組成律，僅需在材料組成律階層進行更改，其餘模組如前段所述均值化方法等，均可繼續使用。如圖 12所示，DAMASK 材料組成律原始碼



(a) Hierarchical structure at a material point.



(b) Modular structure at the hierarchical levels.

圖 11 DAMASK 軟體模組化計算架構

中包含了彈性以及塑性等模組，其原始碼命名方式如括號所示<sup>1</sup>，本研究則針對塑性模組進行更改，實作2.1.2小節中介紹的降伏強度模型與2.1.3小節中的析出動力模型。

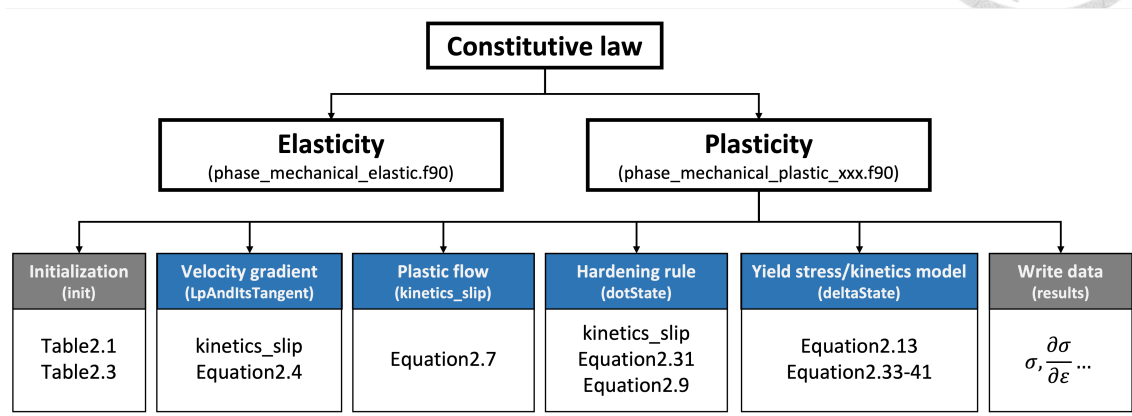


圖 12 DAMASK 中組成律模型相關程式碼示意圖

## 2.2 數據驅動多尺度材料模型

### 2.2.1 代理材料模型

材料模型的主要目的是建立材料微結構在巨觀的力學響應行為，透過輸入巨觀的應變作為 RVE 的邊界條件，藉由 DNS 計算與均值化分析得到輸出的巨觀應力。因此代理材料模型的核心目標為，藉由本章前述小節介紹的材料模型產生訓練資料，透過深度學習的類神經網路學習材料模型中應變與應力之間的非線性力學函式關係。本節將先介紹代理材料模型的深度學習核心架構，並於第四章中接著討論訓練資料集的產生、訓練參數以及模型預測性能評估等。

### 2.2.2 深度學習方法

深度學習的核心目標為從數據中學習輸入與輸出之間的函式關係，並利用該函式關係根據新給定的輸入來預測對應的輸出。深度學習模型由類神經網路組成，透過類神經網路中的權重 (weight) 和偏差 (bias) 將給定的輸入轉換成輸出。為了

<sup>1</sup>原始碼模組以及副程式名稱均取自 DAMASK 3.0.0-alpha4 版本



訓練神經網路，首先根據訓練資料集的輸入以初始的權重和偏差預測輸出，接著定義損失函數 (loss function) 來衡量該預測的輸出與訓練資料中真實的輸出之間的誤差，並透過反向傳播 (back propagation) 以及優化器 (optimizer) 更新神經網路中的權重和偏差來最小化損失值，因此，將此過程不斷的進行迭代訓練後即可得到損失值最小的類神經網路模型，並將其用於預測新資料輸入與輸出間的關係。

### 全連接神經網路

全連接神經網路 (fully connected neural network, FNN) 是深度學習中常見的一種神經網路結構，其模仿人類腦中神經元的行為，由一層或多層全連接層組成，每一層中包含一個或多個神經元。在 FNN 中，每一層的所有神經元都與前一層的所有神經元相連接，如圖 13(a) 所示。假設第  $l$  層有  $n_l$  個神經元，第  $l+1$  層有  $n_{l+1}$  個神經元，則第  $l+1$  層的第  $j$  個神經元的輸入可以表示為

$$z_j^{l+1} = \sigma \left( \sum_{i=1}^{n_l} w_{ij}^{l+1} z_i^l + b_j^{l+1} \right) \quad (2.52)$$

其中， $w_{ij}^{l+1}$  是第  $l$  層的第  $i$  個神經元和第  $l+1$  層的第  $j$  個神經元之間的權重， $b_j^{l+1}$  則是第  $l+1$  層的第  $j$  個神經元的偏差， $z_i^l$  是第  $l$  層的第  $i$  個神經元的輸出， $\sigma$  則是激活函數 (activation function)，如 sigmoid 或 ReLU 等，其通常用於每一層的輸出值後，使得全連接神經網路能夠擁有非線性的表達能力，如圖 13(b) 所示。

### 循環神經網路

針對具有時間序列模態的資料，如語音、文本等，循環神經網路 (recurrent neural network, RNN)[33] 能夠同時考慮當前的輸入和前一個時間點的隱藏狀態，從而捕捉序列型資料中的時間關聯性。在每個時間點，RNN 會根據前一個時間點的隱藏狀態以及當前時間點的輸入產生新的隱藏狀態。為了解決訓練 RNN 時梯度消失、梯度爆炸等問題，長短期記憶網路 (long short-term memory, LSTM)[34]



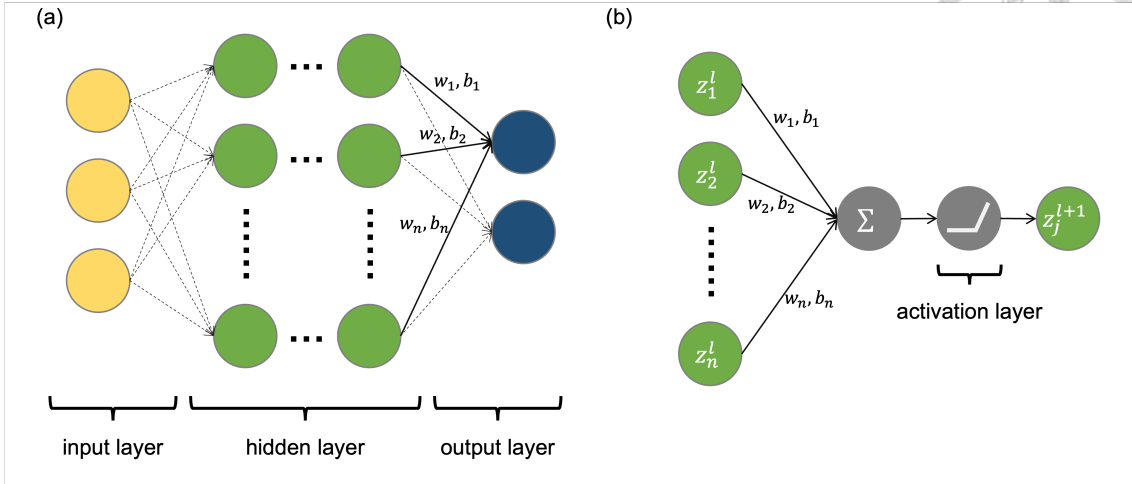


圖 13 全連接神經網路中 (a) 輸入、隱藏及輸出層，(b) 激活函數之模型架構示意圖

以三個閘門 (gate) 分別控制輸入、忘卻以及輸出，如圖 14 所示，其可表示為

$$i_t = \text{sigmoid}(W_{ii}x_t + b_{ii} + W_{hi}h_{t-1} + b_{hi}) \quad (2.53)$$

$$f_t = \text{sigmoid}(W_{if}x_t + b_{if} + W_{hf}h_{t-1} + b_{hf}) \quad (2.54)$$

$$o_t = \text{sigmoid}(W_{io}x_t + b_{io} + W_{ho}h_{t-1} + b_{ho}) \quad (2.55)$$

其中， $x_t$  為時間  $t$  時的輸入； $h_{t-1}$  為上個時間點的隱藏狀態 (hidden state)； $i_t, f_t, o_t$  則分別為時間  $t$  的輸入、忘卻以及輸出閘，通過 sigmoid 激活函數，其值介於  $0 \sim 1$  之間。隱藏狀態的更新則可以寫為

$$g_t = \tanh(W_{ig}x_t + b_{ig} + W_{hg}h_{t-1} + b_{hg}) \quad (2.56)$$

$$c_t = f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot g_t \quad (2.57)$$

$$h_t = o_t \odot \tanh(c_t) \quad (2.58)$$

其中， $g_t$  為輸入  $x_t$  的中間狀態； $c_t$  為記憶狀態 (memory state)； $\odot$  表示 Hadamard product。因此透過 LSTM 的架構，輸入閘能夠控制是否接受當前時間的輸入；忘卻閘能夠控制是否忘卻前一時間點的狀態；輸出閘能夠控制是否輸出當前時間的狀態訊息。

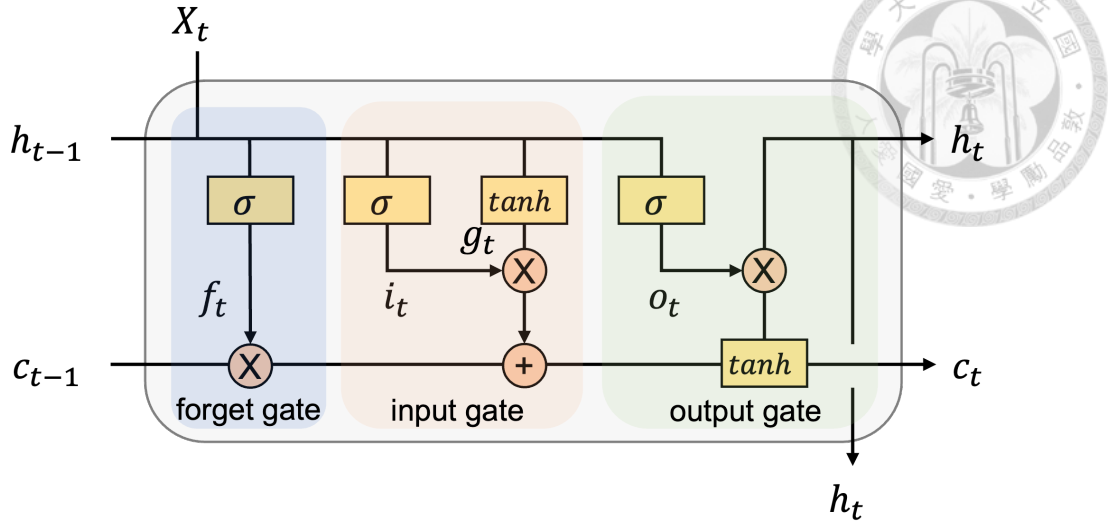


圖 14 LSTM 模型架構示意圖

Linearized Minimal State Cell(LMSC)[21] 基於 RNN 的架構、LSTM 的閘門結構以及 Minimal State Cell(MSC)[20]，針對材料的機械性質特性 (應力、應變) 重新設計循環神經網路的架構。相較於 LSTM，LMSC 能夠以較少的狀態向量 (state vector) 來表達材料歷史相依的非線性行為，同時，保證了輸入的增量形式不受增量的大小影響。如圖 15所示，LMSC 的輸入由時間  $i$  的輸入向量  $\mathbf{x}^{(i)}$  以及時間  $i-1$  的狀態向量  $\chi^{(i-1)}$  組成：

$$\mathbf{l}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(i)} / \|\mathbf{x}^{(i)}\| \\ \chi^{(i-1)} \end{bmatrix} \quad (2.59)$$

其中  $\|\mathbf{x}^{(i)}\| = \sqrt{\frac{2}{3}\mathbf{x}^{(i)} : \mathbf{x}^{(i)}}$ 。接著通過  $n$  層由全連接層  $a$  和  $b$  組成的二次層 (quadratic layer)：

$$\mathbf{l}_n = \tanh(\mathbf{W}_n^a \cdot \mathbf{l}_{n-1} + \mathbf{b}_n^a) * \tanh(\mathbf{W}_n^b \cdot \mathbf{l}_{n-1} + \mathbf{b}_n^b) \quad (2.60)$$



狀態向量  $\chi^{(i)}$  的更新則由  $\alpha$ ， $\beta$  控制，

$$\alpha = \exp(\mathbf{W}_\alpha \cdot \mathbf{l}_n + \mathbf{b}_\alpha) \quad (2.61)$$

$$\beta = \tanh(\mathbf{W}_\beta \cdot \mathbf{l}_n + \mathbf{b}_\beta) \quad (2.62)$$

$$\chi^{(i)} = \exp(-\|\mathbf{x}^i\| \alpha) * (\chi^{(i-1)} - \beta) + \beta \quad (2.63)$$

其中， $\alpha$  可解釋為更新速率， $\beta$  則可解釋為狀態向量的目標值，當  $\|\mathbf{x}^{(i)}\|$  不為零且  $\alpha$  很大時，式2.63中的  $\exp$  項趨近於 0，因此  $\chi^{(i)}$  趨近於  $\beta$ ；反之，當  $\|\mathbf{x}^{(i)}\|$  為零或  $\alpha$  很小時， $\exp$  項趨近於 1，因此  $\chi^{(i)}$  趨近於  $\chi^{(i-1)}$ 。最後，模型的輸出  $\hat{\mathbf{y}}^{(i)}$  為  $\chi^{(i)}$  的線性變換。

$$\hat{\mathbf{y}}^{(i)} = \mathbf{W}_{out} \cdot \chi^{(i)} \quad (2.64)$$

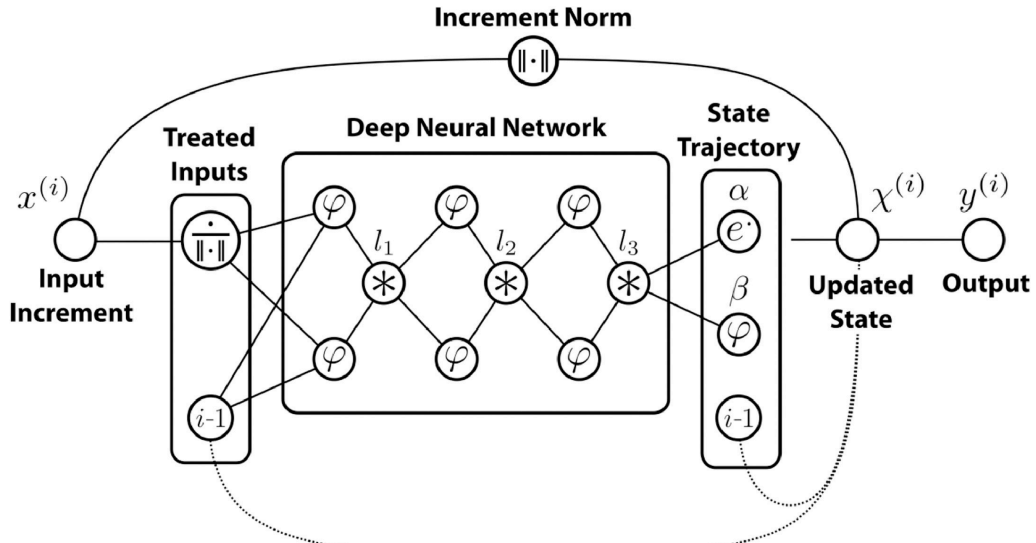


圖 15 LMSC 模型架構示意圖

### 2.2.3 模型整合及實作

數據驅動多尺度材料模擬包含了代理材料模型以及結構分析兩個部分。考慮到串接的方便性以及泛用性，在代理材料模型部分，本研究採用近年來廣泛使用

的 PyTorch 機器學習框架，在 python 環境中進行代理材料模型的訓練。模型訓練完成後，透過 LibTorch 函式庫，能夠快速將代理材料模型的程式碼部署至 C++ 環境中；另一方面，在結構分析部分，本研究採用 Abaqus UMAT，在 C++ 環境中撰寫使用者副程式，利用代理材料模型迭代更新每個材料點的材料性質。

## 2.3 小結

本章節介紹了晶體塑性理論以及材料組成律模型，模型中考慮了包括固溶強化、析出強化、基於差排密度之加工硬化等機制，由於其中包含了大量物理參數資訊，因此本章節亦說明如何自 TEM 與 EBSD 中進行前處理，得到符合真實材料析出物參數與晶體方位等資訊，代入模型中進行模擬。此外，本章節亦介紹了析出動力模型，並於 DAMASK 中實作與晶體塑性模型連結，建立考慮析出物動態變化的多尺度 DNS 模型，多尺度材料模擬完整計算流程如圖 16 所示。另一方面，為了增進多尺度材料模擬的運算效率，本章節介紹了基於深度學習的代理材料模型，並提出一套數據驅動多尺度模擬架構，能夠在深度學習模型訓練完畢後快速的部署至 Abaqus UMAT 中，如圖 17 所示。

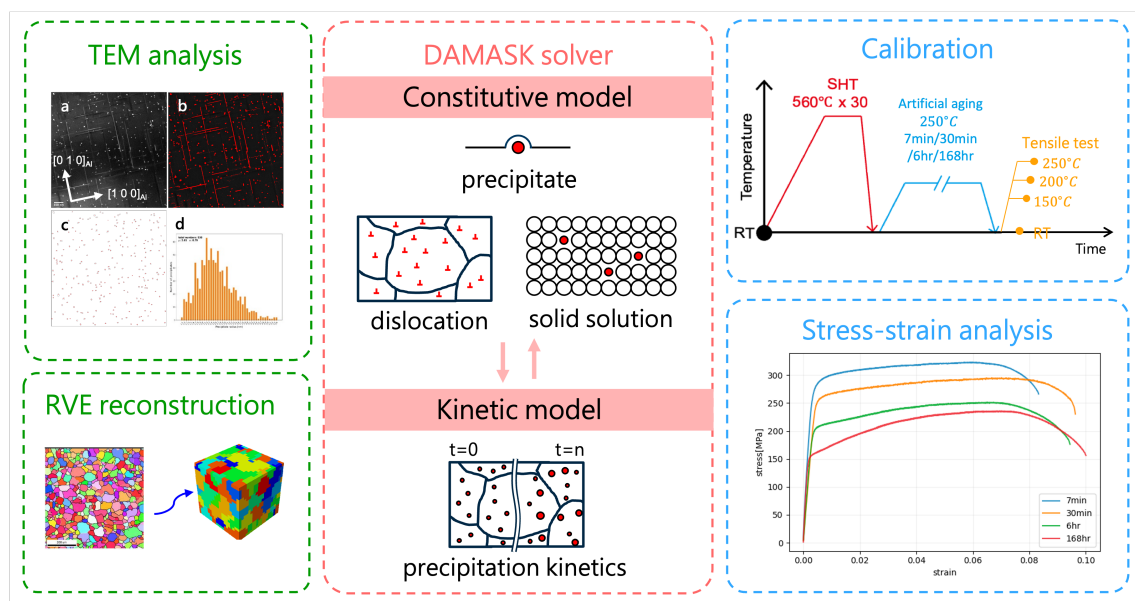


圖 16 多尺度材料模擬計算流程

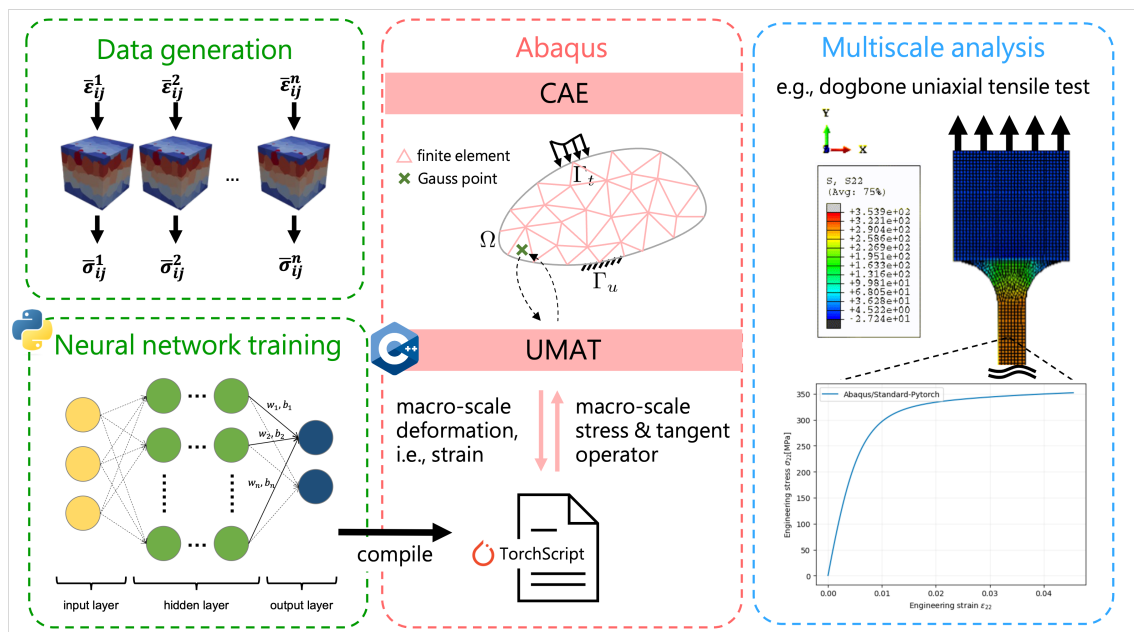


圖 17 數據驅動多尺度模擬計算流程



## 第三章 晶體塑性模型驗證與分析

本章節探討鋁合金在不同時效熱處理條件下的析出物分佈狀態，並分析其常溫以及溫變形之機械性能。在第一小節中以 TEM 影像獲取鋁合金的析出物分佈資訊，並以 2.1.3 小節中介紹的析出動力模型進行分析。第二小節中將析出物參數代入 2.1.1 小節中介紹的晶體塑性模型中進行模擬，並與單軸拉伸實驗進行驗證。最後，在溫變形模擬中探討考慮析出物動態變化對於其機械性質的影響。

本研究使用的 6111 鋁合金成分如表 3 所示，時效熱處理製程則如圖 18 所示。時效熱處理製程為先將鋁合金進行固溶熱處理 (solid solution heat treatment, SHT) 後淬冷，接著分別在  $250^{\circ}\text{C}$  下進行 7 分鐘、30 分鐘、6 小時、168 小時的人工時效，最後以常溫進行拉伸試驗分析其機械性能。此外，針對 7 分鐘的人工時效條件，本研究亦以  $150^{\circ}\text{C}$ 、 $200^{\circ}\text{C}$  以及  $250^{\circ}\text{C}$  進行拉伸試驗分析鋁合金在升溫變形中的機械性能。

表 3 6111 鋁合金成分

| AA6111 composition(wt%) |      |      |     |      |      |
|-------------------------|------|------|-----|------|------|
| Al                      | Si   | Mg   | Cu  | Mn   | Fe   |
| Bal.                    | 0.61 | 0.76 | 0.8 | 0.14 | 0.12 |

### 3.1 顯微結構參數計算

#### 3.1.1 析出物參數實驗分析

圖 19 為高倍率的暗場 TEM 影像，(a-d) 分別對應圖 18(a) 中 7 分鐘、30 分鐘、6 小時以及 168 小時人工時效條件。圖 19 中左側欄位所示為原始 TEM 影像，其中可以觀察到大量  $\beta''$  針狀析出物以及  $Q'$  板狀析出物沿著  $\langle 100 \rangle$  方向分佈，兩者垂

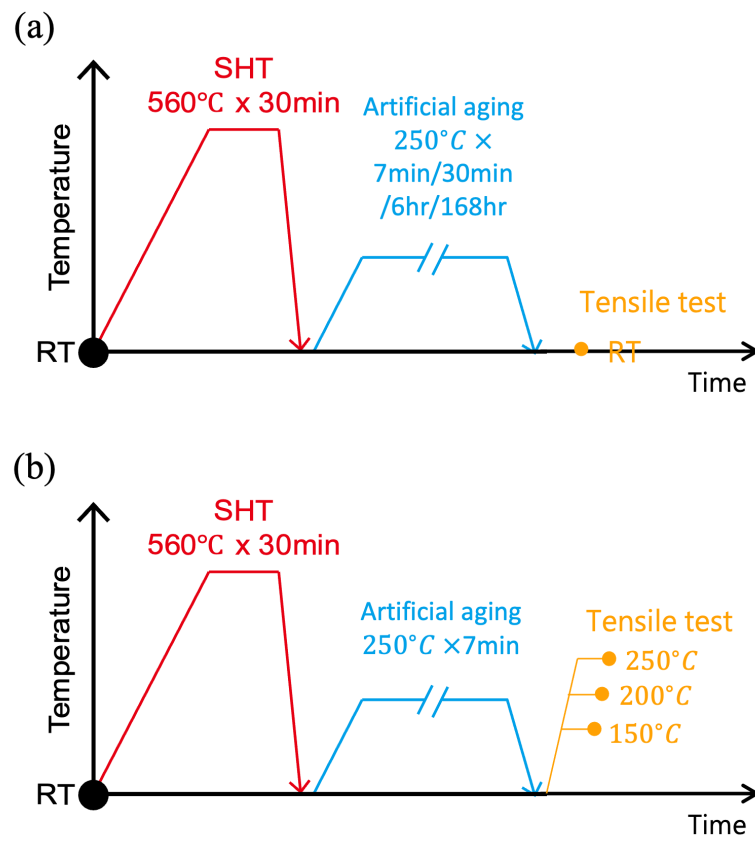


圖 18 6111 鋁合金時效熱處理製程示意圖 (a) 常溫單軸拉伸試驗 (b) 升溫單軸拉伸試驗

直紙面方向先後分別呈圓點、矩形，平行紙面方向則均呈細長狀。此外，隨著人工時效的時間增加，析出物數量逐漸減少，而析出物半徑則逐漸增加，並且隨著人工時效增加，針狀析出物比例逐漸減少，而板狀析出物比例逐漸增加，與 Poole 等人 [26] 的分析結果一致。

為了統計析出物的各項參數，本研究針對 4 種時效條件分別拍攝 12~20 張 TEM 影像，在 7 分鐘以及 30 分鐘的時效條件中均包含超過 1000 筆析出物資訊；6 小時的時效條件中則包含 252 筆析出物資訊；而在 168 小時的時效條件中則因析出物半徑較大，數量密度較低，因此在拍攝的 TEM 影像中僅包含 58 筆析出物資訊，較不具統計代表性。本研究使用 ImageJ 中 Auto Local Threshold 演算法 [35] 進行影像分割，將 TEM 影像背景去除，分割結果如圖 19 中間欄位所示。此處在 TEM 分析中，本研究假設析出物均為  $\beta''$  相，具有相同的析出強化行為，並且均可藉由球狀體積等效平均半徑  $\bar{r}_{eq}$  代入 2.1.2 小節中的組成律模型描述。因此，如圖 19 右側欄位所示，析出物平均半徑  $\bar{r}$  以及數量密度  $N$  可藉由統計 TEM 影像分割結果中呈圓點、矩形的析出物求得，而析出物平均長度  $\bar{l}$  則可藉由統計影像中呈細長狀的析出物求得，最後將參數代入 2.46 即可得到析出物體積分率  $f$ 。自 TEM 影像得到的析出物相關參數均整理於表 4 中。由分析結果得知，隨著時效時間析出物平均半徑、平均長度逐漸增加，而數量密度則逐漸下降。另一方面，除了 30 分鐘時效條件中的體積分率較大外，在其餘時效條件中體積分率均保持約 1.5% 的定值，顯示在 7 分鐘的時效條件時，合金系統中固溶態的溶質濃度已趨於耗盡，析出物狀態處於成長以及粗化的階段。

### 3.1.2 析出動力模型模擬分析

本節以 2.1.3 小節中介紹的析出動力模型進行等溫時效熱處理模擬，並使用上一小節中透過分析 TEM 影像得到的各項析出物參數對模擬結果進行驗證。析出



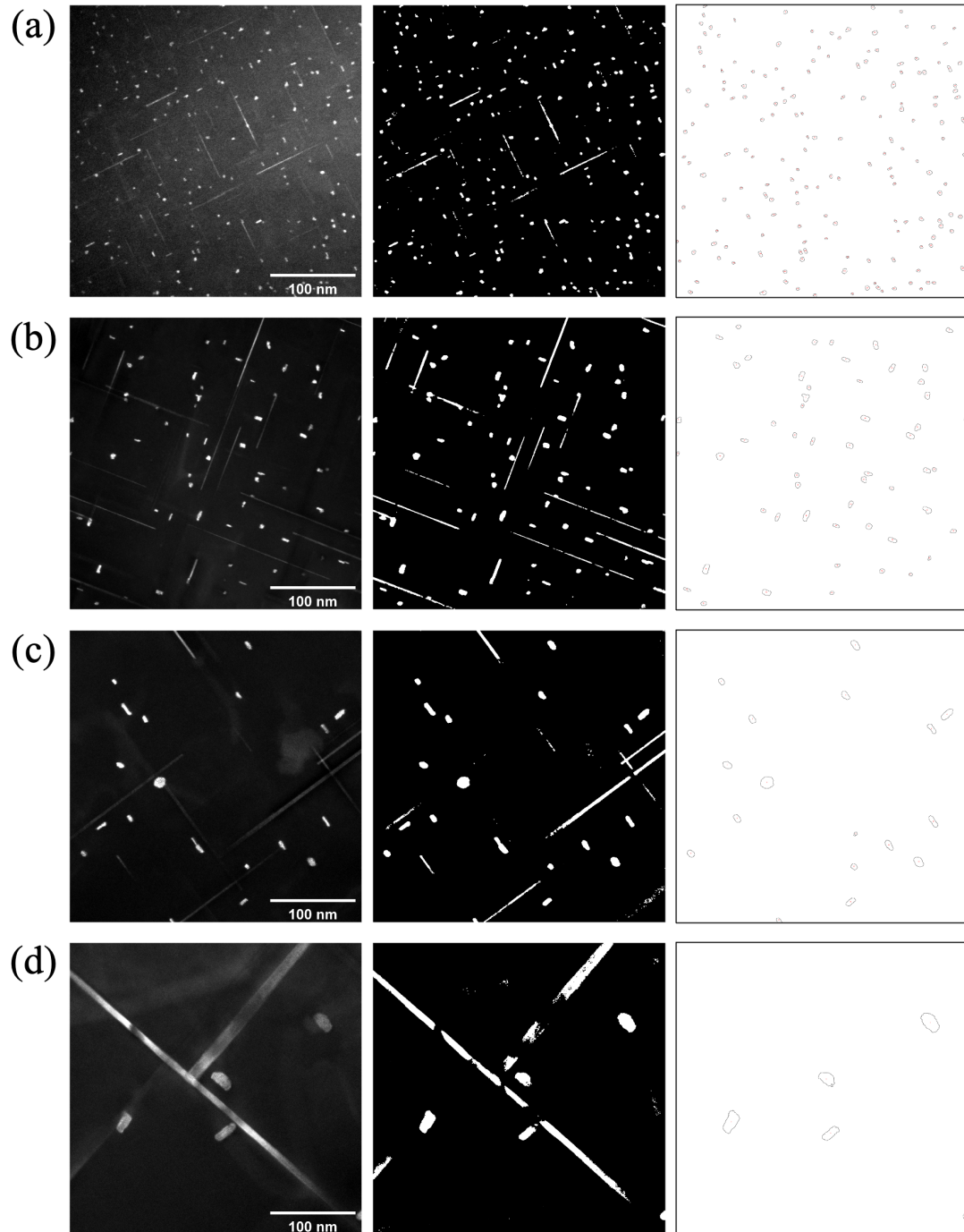


圖 19 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之 TEM 影像 (左側) 與 ImageJ 影像處理結果 (中間、右側)

表 4 TEM 分析析出物參數統整

| condition<br>parameter | 7min   | 30min | 6hr   | 168hr |
|------------------------|--------|-------|-------|-------|
| $\bar{r}(nm)$          | 1.75   | 2.57  | 3.69  | 7.47  |
| $l(nm)$                | 93     | 140   | 298   | 367   |
| $\bar{r}_{eq}(nm)$     | 5.98   | 8.84  | 14.47 | 24.86 |
| $N(10^{20}m^{-3})$     | 151.22 | 45.57 | 9.88  | 1.76  |
| $f(\%)$                | 1.52   | 1.70  | 1.51  | 1.44  |

動力模型以固溶熱處理淬火後的合金狀態為起始條件，在  $250^{\circ}C$  的等溫溫度條件下進行 168 小時的時效熱處理模擬。模擬結果如圖 20 所示，隨著時效時間增加至約 200 秒處，溶質逐漸析出，析出物數量密度與體積分率逐漸增加。此處，根據 Myhr 等人的假設，析出物化學組成均為  $Mg_2Si$ ，因此式 2.37 析出物中 Mg 的濃度  $C_p$  為 63.4wt%，然而， $\beta''$  相析出物化學組成應接近  $Mg_{10}Al_4Si_8$  [36]，其對應的  $C_p$  為 42.2wt%。因此，在 Myhr 等人的假設下形成析出物所消耗的 Mg 溶質濃度較多，導致溶質耗盡後模擬的體積分率較實驗觀測值為小，如圖 20 中淺綠色線所示。考慮到合金系統中溶質與析出物間的平衡會影響到本研究後續的機械性能分析，因此本研究將  $C_p$  修正為 42.2wt%，使模擬結果的體積分率與四個時效條件的 TEM 分析結果一致，如圖 20 中深綠色線所示。

在時效時間約 200 秒後，Mg 溶質濃度  $\bar{C}$  趨近於平衡濃度  $\bar{C}_e$ ，成核速率  $j$  因此急速下降至趨近於零，析出物數量密度達到最大值，隨後，隨著臨界半徑  $r^*$  趨近於平均半徑  $\bar{r}$ ，合金系統逐漸轉為粗化階段。如圖 20 所示，析出動力模型能精準的捕捉 7 分鐘時效條件下的析出物數量密度以及平均半徑，然而在其餘三個時效條件中，相對於實驗觀測值，模型預測的數量密度均為高估，而平均半徑則均為低估，顯示模型的預測低估了析出物的粗化速率。其可能原因為析出動力模型中球狀析出物的假設，相較於針狀、板狀析出物在熱處理時具有較穩定的熱力學性質，導致較慢的粗化速率 [37]。

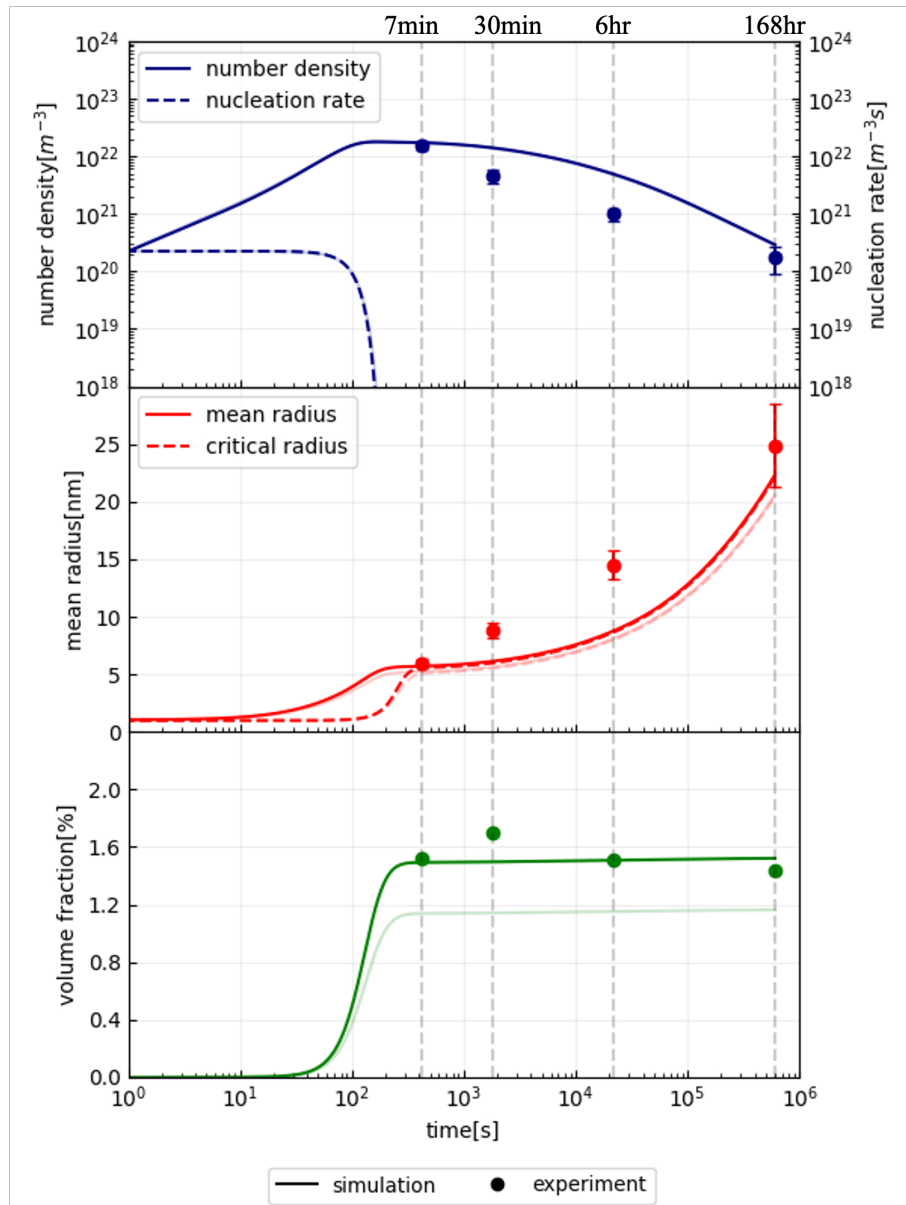


圖 20 析出物數量密度與析出物平均半徑實驗觀測與模擬結果



## 3.2 6111 鋁合金拉伸分析

### 3.2.1 實驗設置與拉伸性能

圖 21(a-b) 為經四種時效熱處理後的鋁合金在常溫下以  $0.001s^{-1}$  應變速率進行單軸拉伸試驗的應力應變曲線以及降伏強度圖，降伏強度均由 0.2% 截距法定義。四種時效條件中，以 7 分鐘降伏強度為最高，達到 290MPa，而在四種時效條件中，隨著時效時間增加，降伏強度持續降低，顯示在  $250^{\circ}C$  進行 7 分鐘時效熱處理為尖峰時效或過時效。圖 21(c) 為四種時效條件在變形至極限抗拉強度，材料頸縮之前的加工硬化曲線圖。在四種時效條件中，以 7 分鐘加工硬化強度最小，而以 168 小時加工硬化強度最大，此外，隨著降伏強度減小，加工硬化強度逐漸增加。圖 21(d) 為硬化率  $\theta$  對加工硬化應力  $\sigma - \sigma_y$  圖 (i.e., Kocks-Mecking plot)，其中 7 分鐘與 30 分鐘加工硬化行為相似，隨著應力增加，在彈性-塑性轉換區後  $\theta$  均以固定斜率  $-\frac{d\theta}{d\sigma}$  遞減至材料頸縮；另一方面，6 小時與 168 小時的加工硬化行為相似，隨著應力增加，在彈性-塑性轉換區後，相比於 7 分鐘與 30 分鐘， $\theta$  值首先保持較大之定值，並隨後以較大之固定斜率  $-\frac{d\theta}{d\sigma}$  遞減至材料頸縮。兩種不同的加工硬化行為顯示，析出物半徑隨時效時間增加，逐漸由可剪切析出物轉變為不可剪切析出物 (i.e., Orowan 析出物)，其導致 GND 密度隨時效時間逐漸增加，加工硬化行為逐漸由 SSD 主導轉變為由 GND 主導 [38]。

圖 22 為 7 分鐘時效熱處理的鋁合金分別在  $150^{\circ}C$ 、 $200^{\circ}C$  以及  $250^{\circ}C$  下以 0.001 應變速率進行單軸拉伸試驗的應力應變曲線以及降伏強度圖。由於該試驗並未使用振弦式伸縮儀 (extensometer)，因此應力應變曲線中彈性楊氏係數無實質意義。相較於常溫拉伸，三種拉伸溫度之延展性均有顯著增加，此外，隨著拉伸溫度上升，差排動態回復速率增加，降伏強度以及極限抗拉強度均有顯著下降。

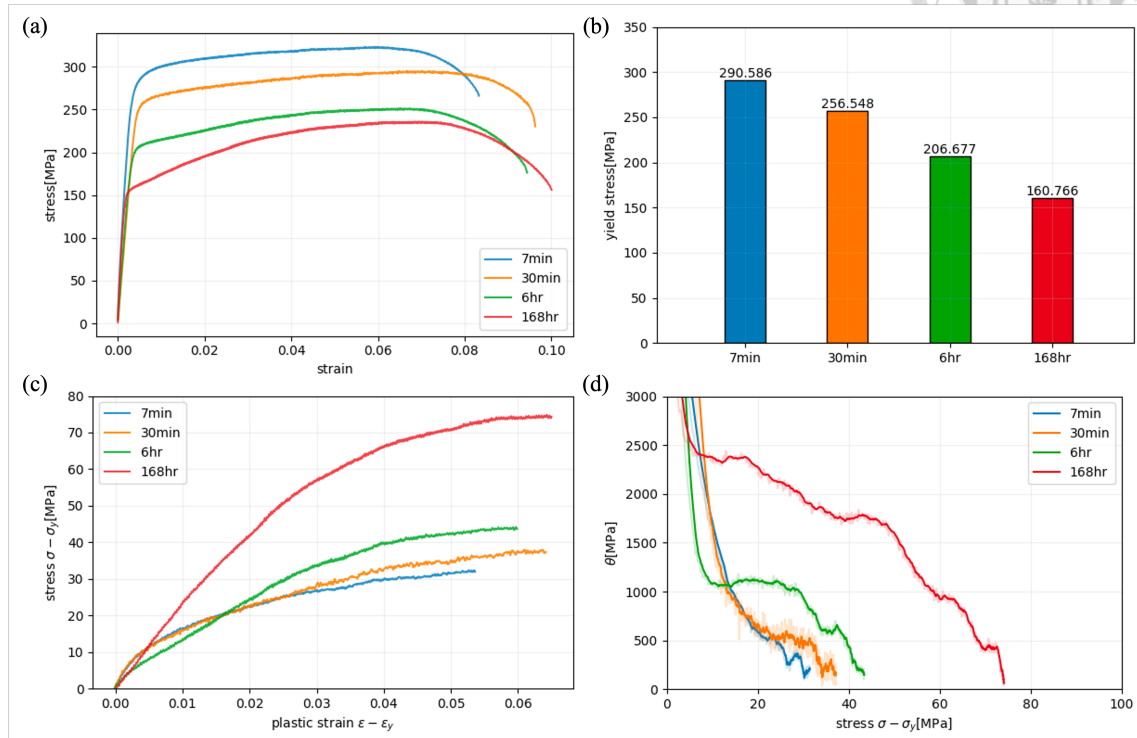


圖 21 四種時效條件之常溫單軸拉伸結果 (a) 應力應變曲線 (b) 降伏強度 (c) 加工硬化曲線 (d) Kocks-Mecking 圖

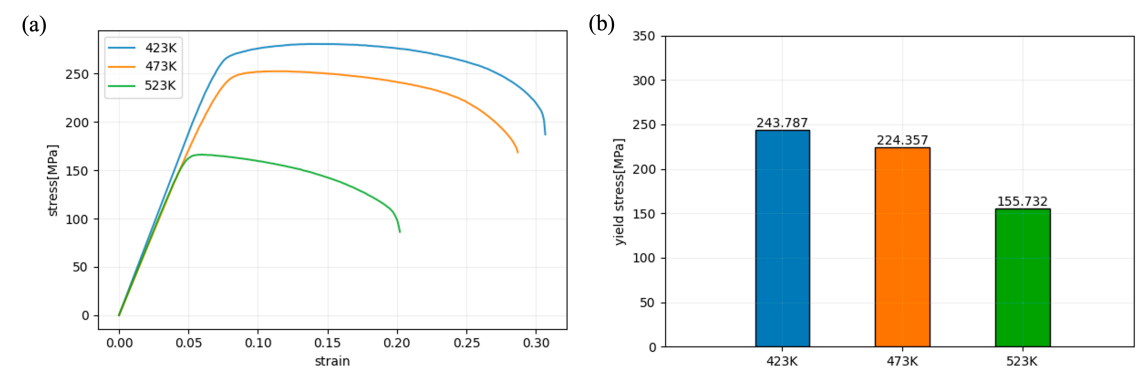


圖 22 7 分鐘時效條件之升溫單軸拉伸結果 (a) 應力應變曲線 (b) 降伏強度



### 3.2.2 模型設置

為了建立符合實驗初始微結構的 RVE 以進行拉伸模擬，本研究針對四種時效條件熱處理後的鋁合金進行 EBSD 分析，並以 DREAM.3D 進行後處理重建晶體方位分佈，晶體方位分佈極圖如圖 23 所示。此外，四個時效條件晶粒尺寸約為  $27\mu m$ ，根據鄭翊良 [6] 之收斂性分析建議，RVE 中需包含 50 個以上的晶粒，因此本研究透過 DREAM.3D，將四個時效條件各自的晶體方位分佈重建為包含 71 個晶粒， $100\mu m \times 100\mu m \times 100\mu m$  的 RVE，並將其切分為  $20 \times 20 \times 20$  個離散材料點。重建之 RVE 模型如圖 24 所示，其中不同顏色代表不同的晶體方位。

### 3.2.3 常溫拉伸模擬分析

晶體塑性模型中包含大量微結構相關物理參數，而部分參數需要經由實驗校正。其中，可剪切-不可剪切析出物之臨界半徑  $r_{trans}$  決定了包括析出強化效應、塑性滑移距離以及 GND 演化等機制，為模型中的關鍵參數。根據 3.2.1 小節中的分析結果，6 小時以及 168 小時時效下的合金系統中應包含較多 Orowan 析出物，GND 貢獻顯著的加工硬化行為；反之，7 分鐘以及 30 分鐘時效下的合金系統則主要由 SSD 控制。因此，在其餘參數固定之下，本研究將  $r_{trans}$  定為 7.2nm，使得等效塑性滑移距離  $\lambda_g^*$  在四種時效條件中逐漸減少，符合拉伸實驗之分析結果。在  $r_{trans}$  的假設下，Orowan 析出物相關參數整理於表 5 中，其中雖然在 30 分鐘時效時 Orowan 析出物之體積分率  $f_o$  即達到最大值，而塑性滑移距離  $\lambda_g$  因此達到最小值，然而此時析出物之半徑與  $r_{trans}$  相近，GND 的累積處於不穩定狀態 [28]，因此將  $\lambda_g$  透過式 2.28 中  $\varphi$  值的進行折減後得到  $\lambda_g^*$ ，較能描述其 GND 效應。

### 降伏強度模擬結果

圖 25 為四種時效條件下，實驗量測與模擬預測降伏強度比較圖。圖中虛線為



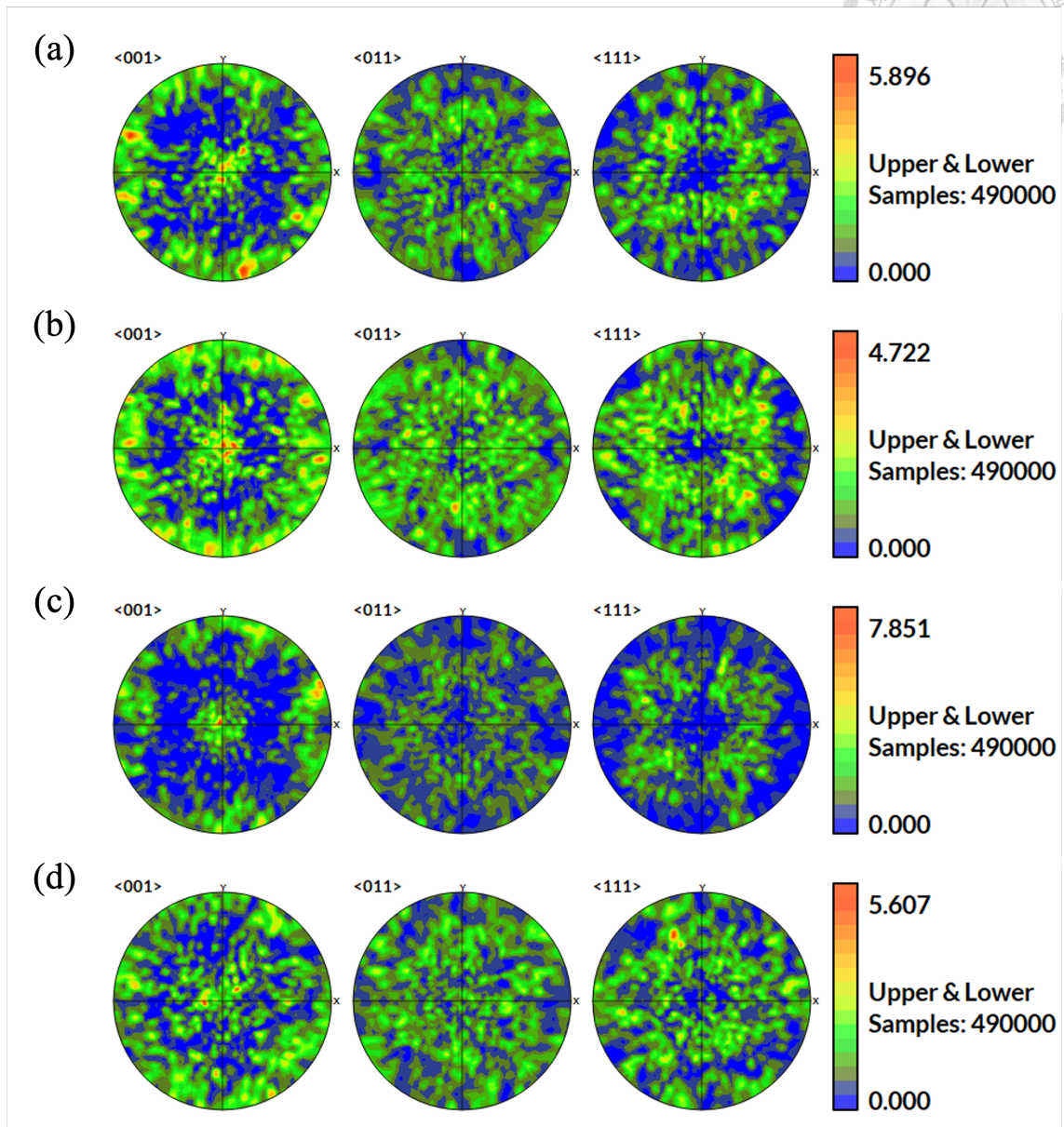


圖 23 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之晶體方位分佈極圖

表 5 晶體塑性模型 Orowan 析出物相關參數整理

| condition<br>parameter | 7min      | 30min   | 6hr     | 168hr   |
|------------------------|-----------|---------|---------|---------|
| $f_o(\%)$              | 0.51      | 1.59    | 1.51    | 1.44    |
| $\lambda_g(nm)$        | 820.23    | 362.27  | 569.76  | 1057.91 |
| $\lambda_g^*(nm)$      | 129022.62 | 3232.82 | 1383.50 | 1263.61 |

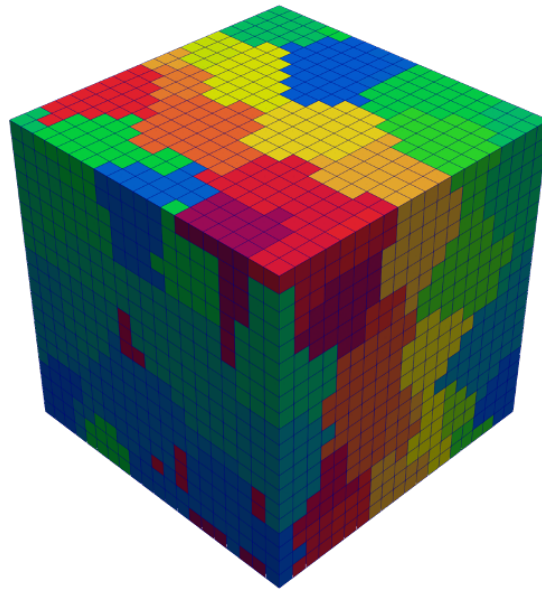


圖 24 晶體塑性模型 RVE 設置

以3.1.1小節中 TEM 分析結果之析出物參數代入降伏強度模型中之預測結果。其中，因四個時效條件之體積分率幾乎相同，合金系統中 Mg、Si、Cu 之溶質濃度約保持定值，因此四種時效條件中固溶強化效應  $\sigma_s$  亦約保持定值。此外，雖析出物平均半徑隨時效時間逐漸增加，逐漸轉變為強度較高之不可剪切析出物，然而其數量密度顯著減少導致析出物之等效間距快速增加，因此析出強化效應  $\sigma_p$  隨時效時間逐漸下降。將上述兩種強化效應代入式2.13中即可得降伏強度，如圖 25 中黑色虛線所示，模型能夠捕捉四個時效條件之降伏強度，其相對誤差均小於 7%。

降伏強度亦可由析出動力模型計算析出物參數代入降伏強度模型中進行預測。如圖 25 中實線所示，析出動力模型以固溶熱處理淬火後的合金狀態為起始條件，在時效時間約 100 至 200 秒處，合金系統中固溶態溶質趨於耗盡， $\sigma_s$  下降而  $\sigma_p$  快速上升，降伏強度由  $\sigma_s$  主導轉為  $\sigma_p$  主導。在達到尖峰時效後  $\sigma_s$  趨於定值，而析出物進入粗化階段，平均半徑隨時效時間逐漸增加而數量密度顯著減少，其趨勢符合前段以實驗析出物參數預測降伏強度之結果。然而，在時效 7 分鐘處，雖圖 20 中顯示析出模型能夠良好的捕捉其析出物平均參數，結合降伏強度模型之預測仍明顯低估材料降伏強度。推測其原因為析出動力模型預測之球狀假設導致



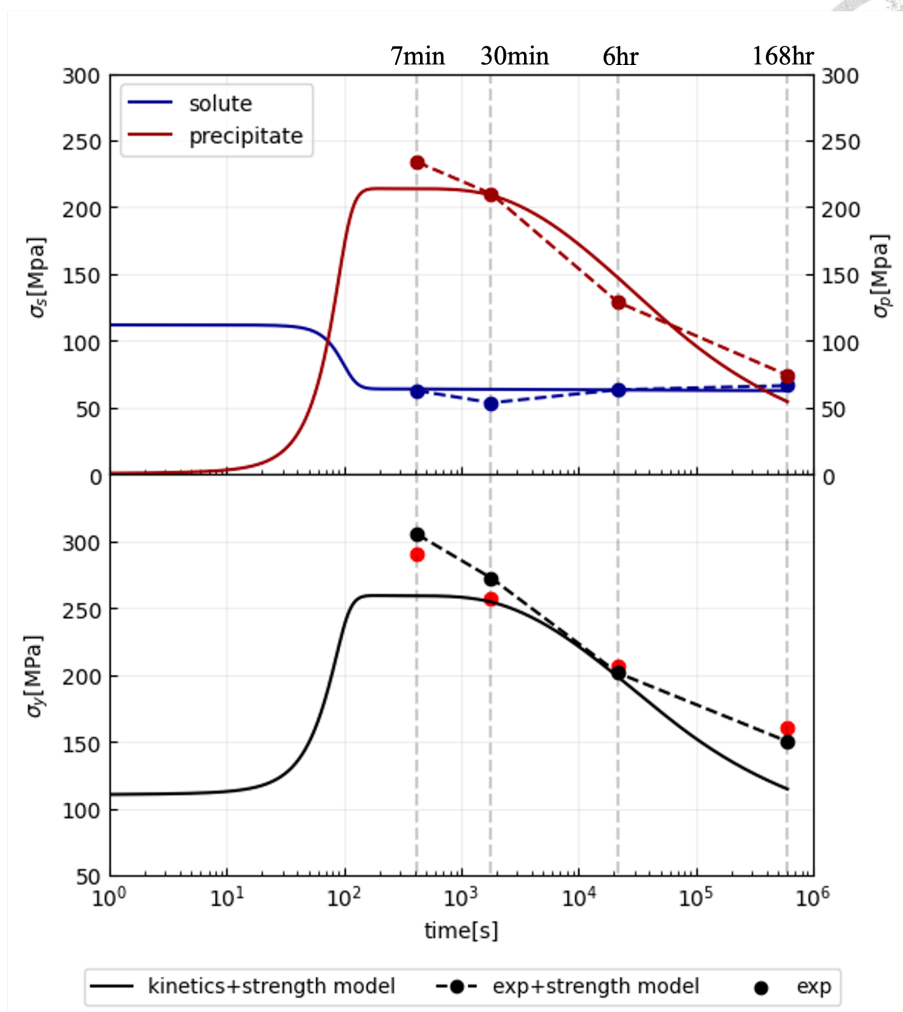


圖 25 四種時效條件實驗量測與模型預測之降伏強度分析

預測之析出物粒徑分佈 (PSD) 傾向較窄 [37]，因此式2.17中之析出物強度過度折減而低估降伏強度。

### 加工硬化模擬結果

本研究針對四種時效條件使用3.2.2小節中的 RVE 模型，以  $0.001s^{-1}$  之應變速率進行常溫拉伸模擬至 7% 應變。在前段降伏強度模型的討論中，式2.13中的  $n$  值由於  $\sigma_d$  為零可先忽略不計，然而，在加工硬化模型中  $n$  值會大幅影響其模擬結果，因此需要透過實驗進行校正。根據 Cheng 等人 [38] 所述，尖峰時效前  $n$  值應接近 1，而隨時效熱處理達到尖峰時效時，初始硬化率急劇減少， $n$  值應接近 1.5 至 2 之間。本研究則以 7 分鐘時效之加工硬化曲線進行擬合，將  $n$  值定為 1.3，與



Lu 等人得到相似之結果 [25]。

四種時效條件之加工硬化模擬結果如圖 26 所示，此處將兩軸之原點平移至應力應變曲線之降伏點，忽略降伏強度模型的誤差而僅討論加工硬化行為。模擬結果顯示模型能夠精準的捕捉到 7 分鐘以及 6 小時時效之加工硬化曲線，而在 30 分鐘以及 168 小時時效條件中則誤差較大。根據 3.2.1 小節中的分析結果，30 分鐘時效的加工硬化行為應由 SSD 主導，而 168 小時時效的加工硬化行為則應由 GND 主導。在 30 分鐘時效條件中，根據式 2.20，加工硬化模型中 SSD 密度  $\rho_{ssd}$  的演化由排增生項  $k_1$  與回復項  $k_2$  控制，其中  $k_2$  與 Mg 溶質濃度有關，當 Mg 溶質濃度下降時  $k_2$  急遽上升 [11]。在合金系統處於過時效條件下，溶質濃度趨於耗盡而析出物體積分率應隨時效時間趨於維持定值，然而 3.1.1 小節中的分析結果中，30 分鐘時效之析出物體積分率相比其餘時效較高，造成計算得到較小之 Mg 溶質濃度，進而得到較大之  $k_2$ ，如表 6 所示。因此，在 30 分鐘時效條件下，模型雖然仍能捕捉初始硬化行為，但受到較大的  $k_2$  影響，在塑性變形持續增加時趨於低估加工硬化行為。另一方面，在 168 小時時效中，模型在初始硬化率的預測已有較大誤差，顯示模型低估 GND 效應的強度貢獻。

表 6 常溫拉伸分析中加工硬化模型相關參數整理

| parameter \ condition       | 7min  | 30min  | 6hr    | 168hr  |
|-----------------------------|-------|--------|--------|--------|
| $k_2$                       | 51.73 | 86.93  | 50.18  | 43.82  |
| $k_{1g}^* (10^{12} m^{-1})$ | 3.10  | 123.73 | 289.12 | 316.55 |
| $k_{2g}$                    | 13.88 | 43.14  | 40.93  | 39.12  |

加工硬化模型中除了 SSD 以外，根據式 2.29，GND 密度  $\rho_{gnd}$  演化亦由差排增生項  $k_{1g}$  以及回復項  $k_{2g}$  控制，四個時效之相關參數統整於表 6 中，其中定義  $k_{1g}^* = k_{1g}/\lambda_g^*$ 。在 7 分鐘時效下， $k_{1g}^*$  受到較大的 Orowan 等效塑性滑移距離  $\lambda_g^*$  抑制，其值較小，加工硬化行為由  $\rho_{ssd}$  主導，其差排密度演化如圖 27(a) 所示。隨著時效時間增加  $\lambda_g^*$  減小， $\rho_{gnd}$  因此在 30 分鐘、6 小時以及 168 小時時效中逐漸造

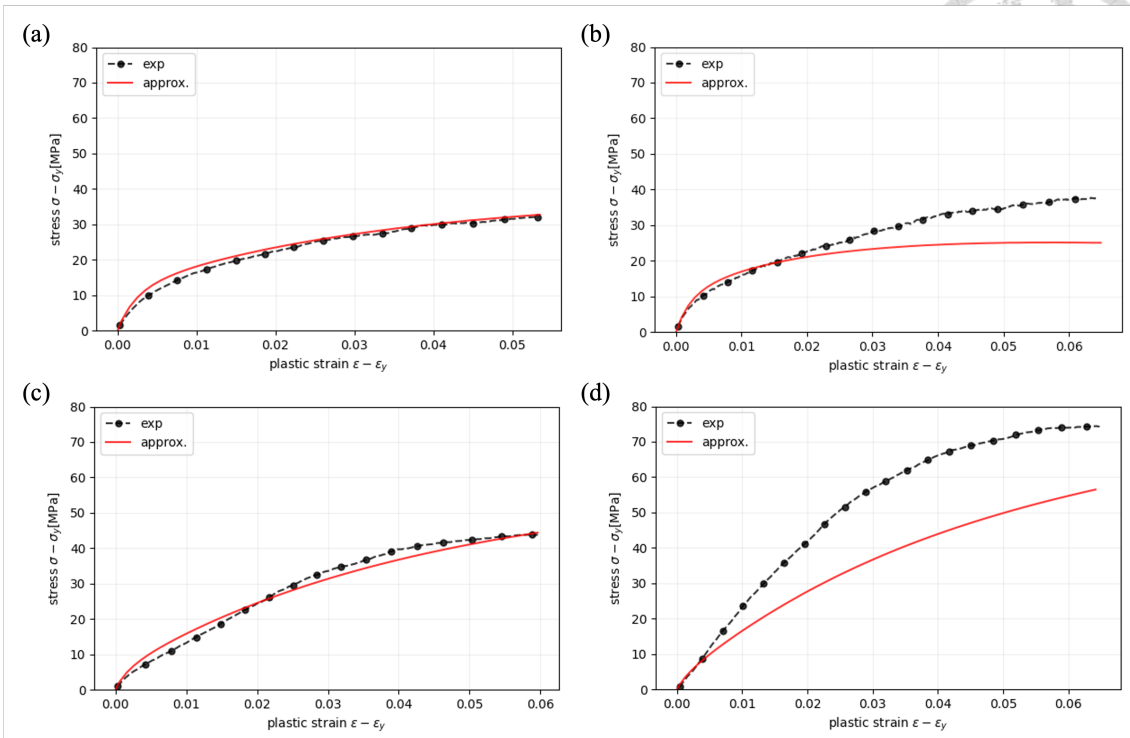


圖 26 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之實驗與模擬應力應變曲線

成顯著的加工硬化效應。此外，圖 27(c-d) 中顯示，在塑性變形剛啟動時，因系統中包含較多的 Orowan 析出物， $\rho_{gnd}$  佔據主導地位，而隨塑性變形繼續增加， $\rho_{ssd}$  與  $\rho_{gnd}$  演化曲線出現交叉，加工硬化行為轉為由  $\rho_{ssd}$  主導，與 Ashby 等人 [39] 描述之含有大量不可剪切析出物之鋁合金行為一致。

### 3.2.4 升溫拉伸模擬分析

圖 28(a) 為 7 分鐘時效條件之鋁合金，在不同溫度下實驗量測以及模型預測之降伏強度比較圖。其中紅色實線為模型在模擬過程中考慮析出物之動態變化，耦合晶體塑性模型與析出動力模型之結果 (以下稱為 NS 模型)；反之，藍色虛線則為模型假設析出物狀態在模擬過程中均保持相同 (以下稱為 S 模型)。相較於 S 模型，NS 模型在溫度小於  $277^{\circ}\text{C}$  ( $550\text{K}$ ) 時，由於析出反應較慢，降伏強度預測結果並無明顯區別。兩者在  $150^{\circ}\text{C}$  以及  $200^{\circ}\text{C}$  之溫變形中均可準確的捕捉材料之降伏強度，然而隨溫度增加則逐漸高估材料之降伏強度。NS 模型在溫度大於  $277^{\circ}\text{C}$

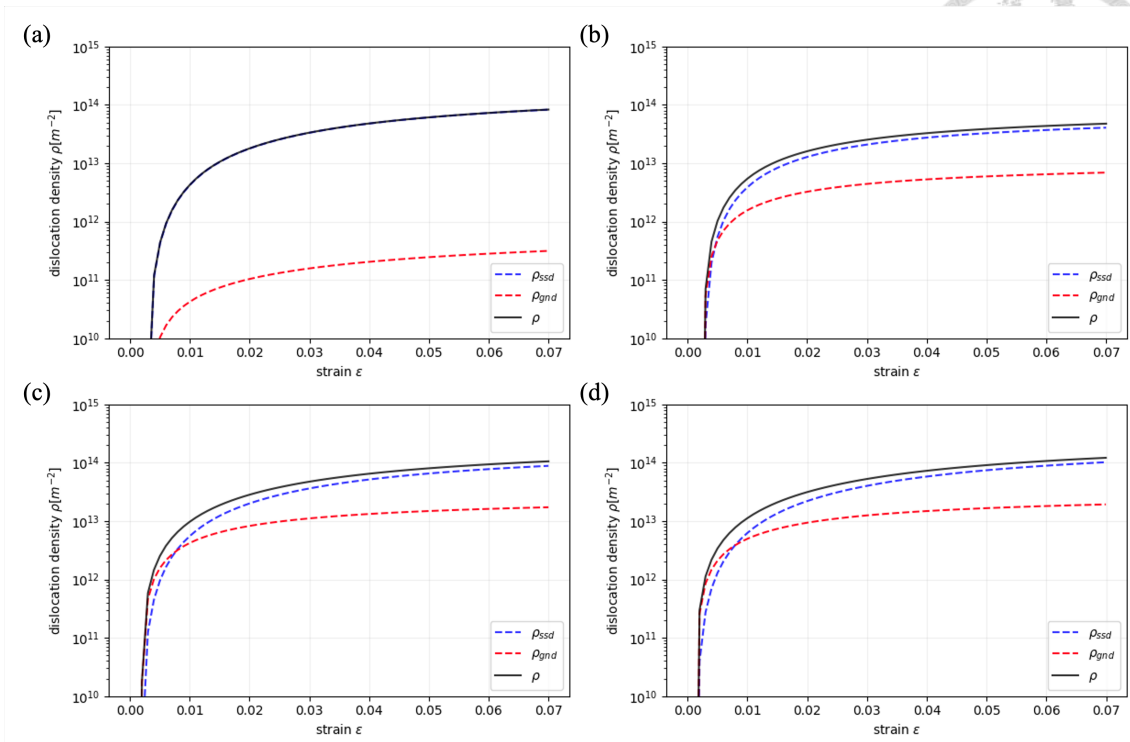


圖 27 6111-T6 鋁合金進行 (a)7min、(b)30min、(c)6hr、(d)168hr 時效熱處理之差排密度演化曲線

時，由於析出反應較快，合金系統中之析出物持續粗化造成降伏強度下降，預測結果在 7 分鐘時效條件的溫變形中較符合降伏強度隨溫度之變化趨勢。

與前一小節類似，本研究針對 7 分鐘時效條件之鋁合金，使用 3.2.2 小節中的 RVE 模型以  $0.001s^{-1}$  之應變速率在  $150^{\circ}C$ 、 $200^{\circ}C$  以及  $250^{\circ}C$  下進行拉伸模擬至 7% 應變。如表 7 所示，隨著溫度上升，模型中 SSD 與 GND 的差排動態回復項  $k_2$  與  $k_{2g}$  受到 Zener-Hollomon 參數  $Z$  控制而有顯著增加，反映圖 28(b-d) 中之加工硬化效應，隨著溫度上升差排動態回復效應增強而因此逐漸減少。相似於降伏強度模型，加工硬化模型在  $150^{\circ}C$  以及  $200^{\circ}C$  拉伸模擬中仍能較好的捕捉實驗加工硬化趨勢，而在  $250^{\circ}C$  拉伸模擬中則傾向高估。

表 7 升溫拉伸分析中加工硬化模型相關參數整理

| parameter | temperature( $^{\circ}C$ ) |        |        |
|-----------|----------------------------|--------|--------|
|           | 150                        | 200    | 250    |
| $k_2$     | 81.08                      | 107.00 | 137.41 |
| $k_{2g}$  | 62.23                      | 107.75 | 169.07 |

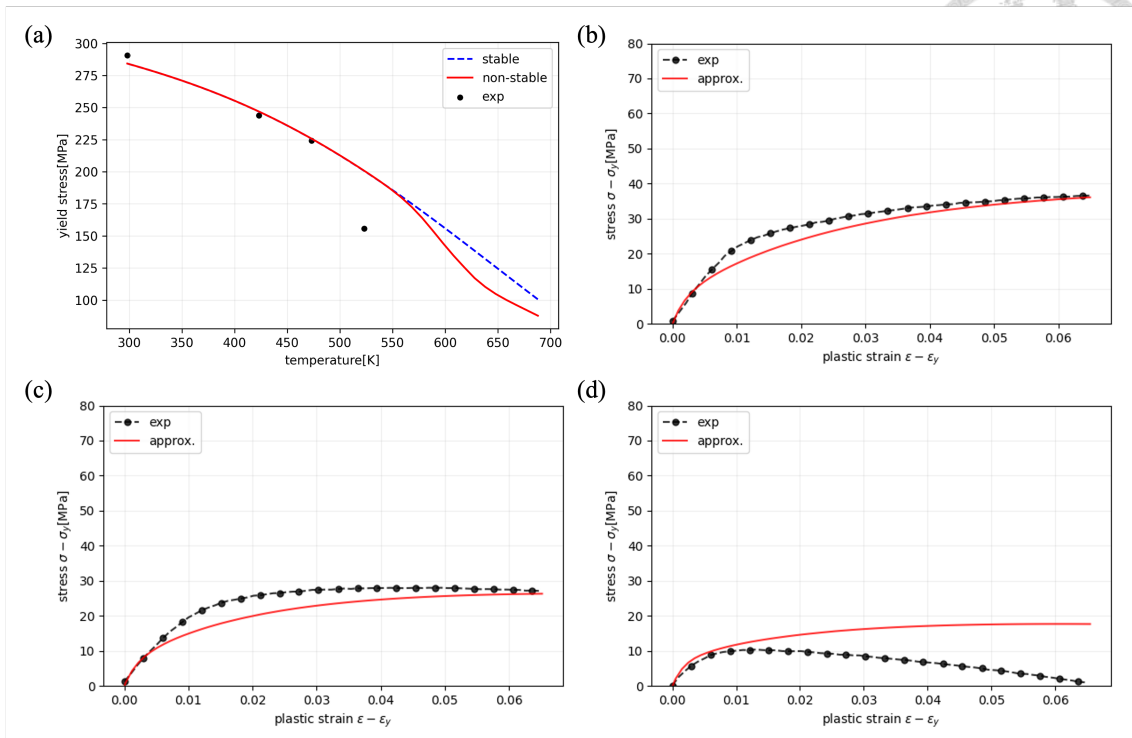


圖 28 不同溫度下模擬結果分析 (a) 降伏強度分析 (b)150°C、(c)200°C、(d)250°C 單軸拉伸之加工硬化分析

最後，考慮到上述升溫變形中，因 7 分鐘時效條件下的溶質約已析出完畢，而在  $0.001s^{-1}$  之應變速率下，變形模擬過程中析出物狀態並無顯著改變，無法比較 S 模型以及 NS 模型之差異。因此為了展現 NS 模型的重要性，本研究以 SHT 淬火後的合金狀態為模擬初始條件，以  $0.001s^{-1}$  之應變速率在 250°C 下進行拉伸模擬。模擬結果之加工硬化預測如圖 29(a) 所示，其中 S 模型預測之加工硬化曲線在變形過程中由於未考慮析出物動態變化， $\sigma_s$  以及  $\sigma_p$  均為定值，如圖 29(b) 虛線所示。因此，材料之加工硬化行為完全由差排密度控制，在變形較大時因差排動態回復效應，差排密度趨於飽和，材料強度無法繼續提升。另一方面，NS 模型則在變形過程中考慮了析出物之動態變化，因此在 250°C 變形過程中，溶質析出， $\sigma_s$  以及  $\sigma_p$  均能動態更新，在高溫或是應變速率較慢之變形中，較能真實捕捉析出物狀態並即時反映至降伏強度預測中。

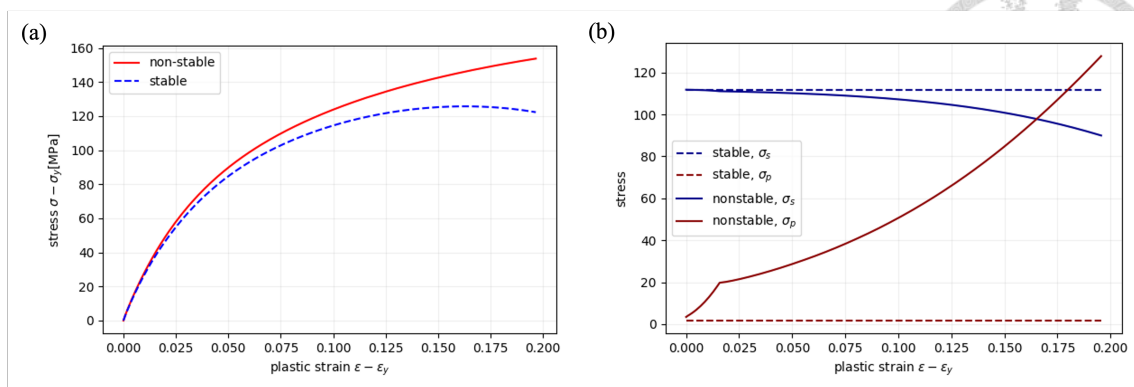


圖 29 S 模型與 NS 模型模擬結果比較 (a) 加工硬化曲線 (b) 固溶、析出強化效應

### 3.3 小結

本章節首先以 TEM 影像分析 6111 鋁合金 SHT 後在  $250^{\circ}\text{C}$  下進行 7 分鐘、30 分鐘、6 小時、168 小時，四種不同人工時效條件下之析出物參數。分析結果中，四種時效析出物體積分率約為定值，數量密度隨時效時間減少而平均半徑增加，顯示析出物處於粗化階段。此外，析出動力模型能夠準確的捕捉數量密度與平均半徑隨時效時間之趨勢，然而析出動力模型預測之粗化速率相較實驗量測值皆為低估，可能為析出動力模型中析出物球狀假設導致。

接著，本研究根據 EBSD 重建符合實驗量測晶體方位分佈的 RVE 進行常溫以及升溫拉伸模擬，探討各時效條件之材料機械性能。在常溫變形的討論中，降伏強度模型分別以 TEM 影像分析之析出物參數，以及析出動力模型模擬之析出物參數為輸入，前者能夠準確的預測四個時效條件的降伏強度，而後者在 7 分鐘以及 168 小時時效中較為低估其降伏強度，推測為模擬之 PSD 較窄導致。另一方面，加工硬化模型透過 SSD 以及 GND 機制的控制，在常溫變形中除了 168 小時時效外，均能精準預測加工硬化行為。在三種升溫變形的討論中，降伏強度與加工硬化模型均能預測因溫度上升差排回復效應增強導致降伏強度之下降，然而在高溫變形中誤差較大。此外，NS 模型能夠在拉伸模擬同時考慮析出物之動態變化，並即時反映至材料強度，在析出反應速率較大之合金系統的拉伸模擬中較能

精準捕捉材料性質。最後，本章節討論的各種時效、拉伸條件下晶體塑性模型在初始降伏點後的預測誤差如圖 30 所示，其中虛線表示相對誤差  $\pm 10\%$ 。

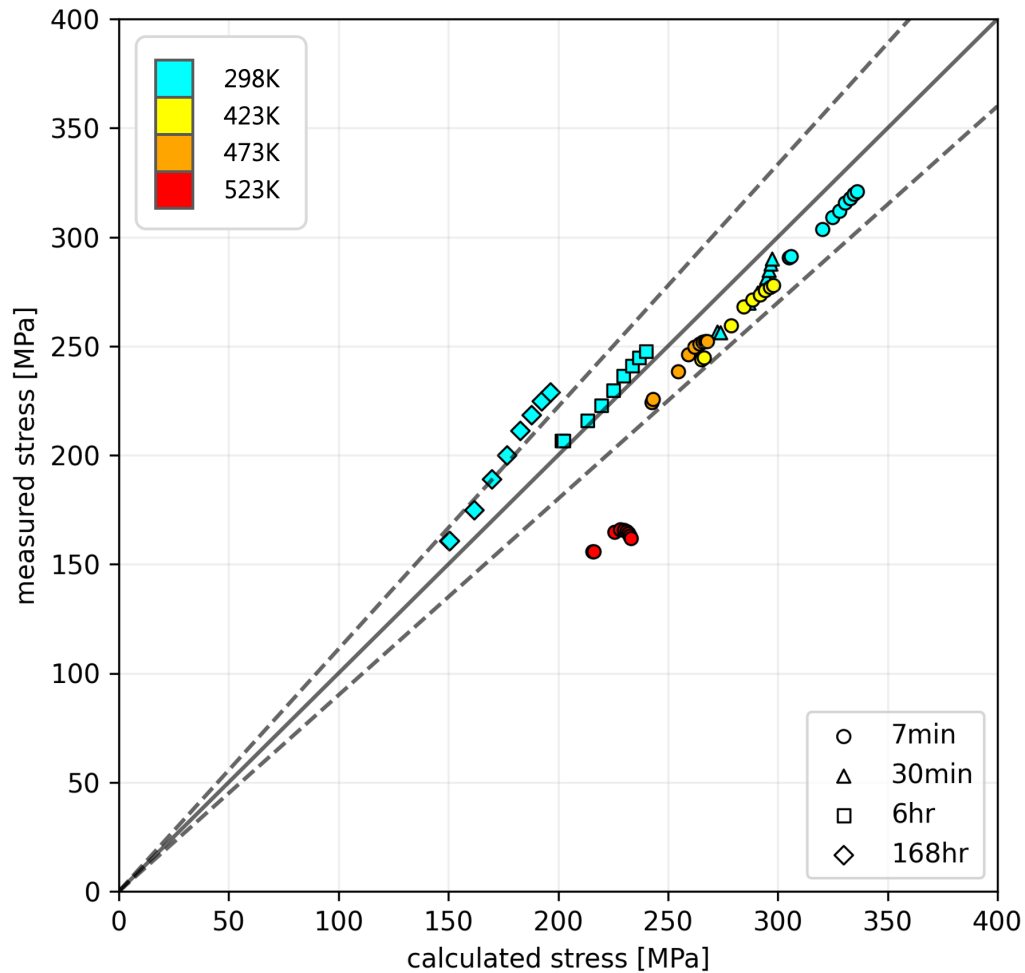


圖 30 晶體塑性模型於 6111-T6 鋁合金於各時效條件之常溫與升溫拉伸預測能力驗證





## 第四章 數據驅動多尺度模擬驗證與應用

為了在巨觀的結構分析中使用代理材料模型進行計算求解，代理材料模型在複雜變形條件下的泛用性和數值穩定性是其中的關鍵因素。因此，本章節首先討論了資料集的產生方式以及代理材料模型的訓練方法和結果。接著，透過2.2.3小節中介紹的多尺度模擬計算框架，本研究將代理材料模型部署至 Abaqus UMAT 以進行數據驅動多尺度模擬。為了驗證該架構的正確性，本研究首先進行單元素驗證，接著進行懸臂樑彎曲以及狗骨頭單軸拉伸試驗，並比較其運算效率。

### 4.1 代理材料模型

#### 4.1.1 資料集產生

本研究針對 AA6111 鋁合金，利用在第3章節中所建立的晶體塑性模型產生資料集。為了簡化問題的複雜度，本研究假設 RVE 的初始微結構均相同，並且在變形過程中保持常溫條件，即模擬過程中析出物成長或溶解速率極小可忽略，僅針對複雜變形路徑下的變形行為訓練代理材料模型。因此，本研究以 DREAM.3D 產生 71 個隨機晶體方位，建立包含  $20 \times 20 \times 20$  元素的 RVE，並且以圖 18 中  $250^{\circ}\text{C}$ 、7 分鐘熱處理時效的析出物顯微結構參數為晶體塑性模型輸入參數。基於上述假設，代理材料模型以 RVE 的平均應變增量為輸入，平均應力為輸出。

為了建立包含任意變形路徑的資料集，本研究將總變形時間  $T$  (本研究使用 100 秒) 劃分為  $N$  等分，即時間間隔  $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \dots = \Delta t_N$ ，其中



$\Delta t_n = t_n - t_{n-1}, n = 1, 2 \dots N$ ，並在變形梯度分量中隨時間進行隨機漫步 (random walk)：

$$(F_{ij})_n = \begin{cases} \delta_{ij} & n = 0 \\ (F_{ij})_{n-1} + \nu_n F_{max} \sqrt{\Delta t_n} & n > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

其中， $\nu_n \in \{-1, 0, 1\}$  且遵循離散均勻分布，為在隨機漫步過程中控制方向的參數； $F_{max}$  為最大變形增量，本研究使用  $1/300$ 。透過  $m$  次 Hermite 多項式將  $\{t_n, (F_{ij})_n\}$  進行擬合得到連續平滑變形路徑  $F_{ij}(t)$ ，最後從  $F_{ij}(t)$  中均勻採樣 1000 個時間增量步 (increment) 作為晶體塑性模型的邊界條件。

根據產生變形路徑中所使用的參數  $(N, m)$ ，本研究產生的資料集可分為兩類：資料集  $R : (N, m) = (10, 8)$ ，其變形路徑如圖 31(a) 所示；以及資料集  $S : (N, m) = (4, 5)$ ，其變形路徑如圖 32(a) 所示，圖中變形路徑皆以對數應變 (logarithmic strain)  $\epsilon = \frac{1}{2} \ln \left( \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} \right)$  表示。圖 31(b) 以及圖 32(b) 為以該變形路徑作為邊界條件進行 DNS 模擬後得到的應力響應，其以柯西應力 (Cauchy stress)  $\sigma$  表示。

此外，本研究將應力的計算拆解為靜水應力 (hydrostatic stress) 以及軸差應力 (deviatoric stress)，即：

$$\sigma = \sigma_{hyd} + \sigma_{dev} \quad (4.2)$$

並將代理材料模型的輸入應變增量以及輸出應力限制於軸差項 [40]。因此，代理

材料模型在時間增量步  $i$  的輸入  $\mathbf{x}^{(i)}$  以及輸出  $\mathbf{y}^{(i)}$  可以表示為：

$$\mathbf{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} (\Delta\epsilon_{xx}^{(i)} - \Delta\epsilon_{yy}^{(i)}) / \sqrt{2} \\ (2\Delta\epsilon_{zz}^{(i)} - \Delta\epsilon_{xx}^{(i)} - \Delta\epsilon_{yy}^{(i)}) / \sqrt{6} \\ \sqrt{2}\Delta\epsilon_{xy}^{(i)} \\ \sqrt{2}\Delta\epsilon_{xz}^{(i)} \\ \sqrt{2}\Delta\epsilon_{yz}^{(i)} \end{bmatrix}, \mathbf{y}^{(i)} = \frac{1}{S_0} \begin{bmatrix} (\sigma_{xx}^{(i)} - \sigma_{yy}^{(i)}) / \sqrt{2} \\ (2\sigma_{zz}^{(i)} - \sigma_{xx}^{(i)} - \sigma_{yy}^{(i)}) / \sqrt{6} \\ \sqrt{2}\sigma_{xy}^{(i)} \\ \sqrt{2}\sigma_{xz}^{(i)} \\ \sqrt{2}\sigma_{yz}^{(i)} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

其中， $S_0$  用於將模型輸出標準化。靜水應力  $\sigma^{(i)}$  則透過體積模數  $K$  進行計算：

$$\sigma_{hyd}^{(i)} = \sigma_{hyd}^{(i-1)} + K(tr(\Delta\epsilon^{(i)})) \quad (4.4)$$

其中  $tr(\cdot)$  函數表示張量的跡數 (trace)。因此，在時間增量步  $i$  中給定應變增量  $\Delta\epsilon^{(i)}$ ，應力的計算流程為，透過4.3由代理材料模型預測軸差應力，接著由4.4計算靜水應力，最後透過4.2得到預測應力  $\hat{\sigma}^{(i)}$ 。

在資料集  $R$  和資料集  $S$  中，代理材料模型的輸入  $\mathbf{x}^{(i)}$  以及輸出  $\mathbf{y}^{(i)}$  分別如圖 31(c-d) 以及圖 32(c-d) 所示。本研究針對資料集  $R$  和資料集  $S$  分別產生 5000 筆資料，將其中 70% 作為訓練資料集，30% 作為驗證資料集。此外，以簡單變形路徑，包括單軸拉伸、單軸壓縮以及簡單剪切變形的邊界條件產生資料作為測試資料集。

#### 4.1.2 訓練方法

本研究以2.2.2小節中介紹的 LMSC 作為模型架構，採用平均絕對誤差 (mean absolute error, MAE) 作為損失函數，並以 Ranger[41] 作為優化器進行訓練。Ranger 中能以 AdamW[42] 或 MADGRAD[43] 為核心優化器，結合了 LookAhead[44] 以及 RAdam[45] 技術，能夠避免在訓練過程中落入局部最小值的同時具有快速收

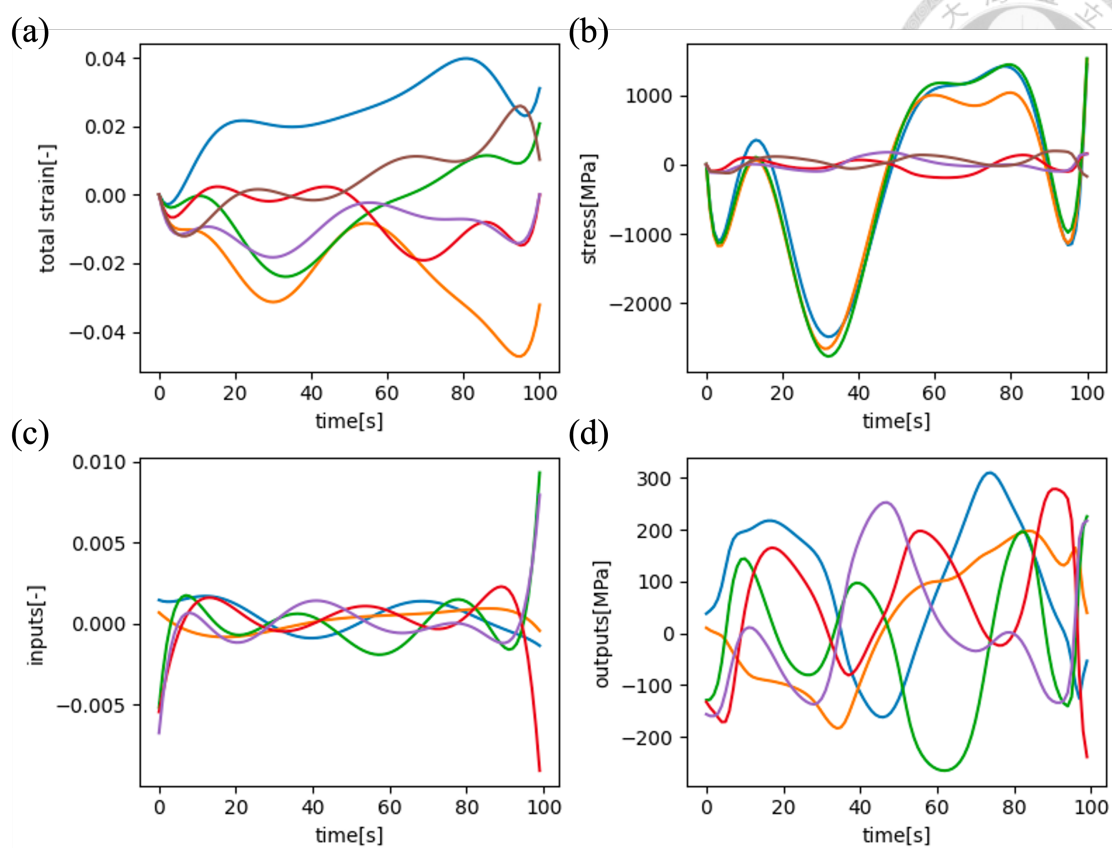


圖 31 資料集  $R$  之 (a) 應變、(b) 應力、(c) 模型輸入、(d) 模型輸出

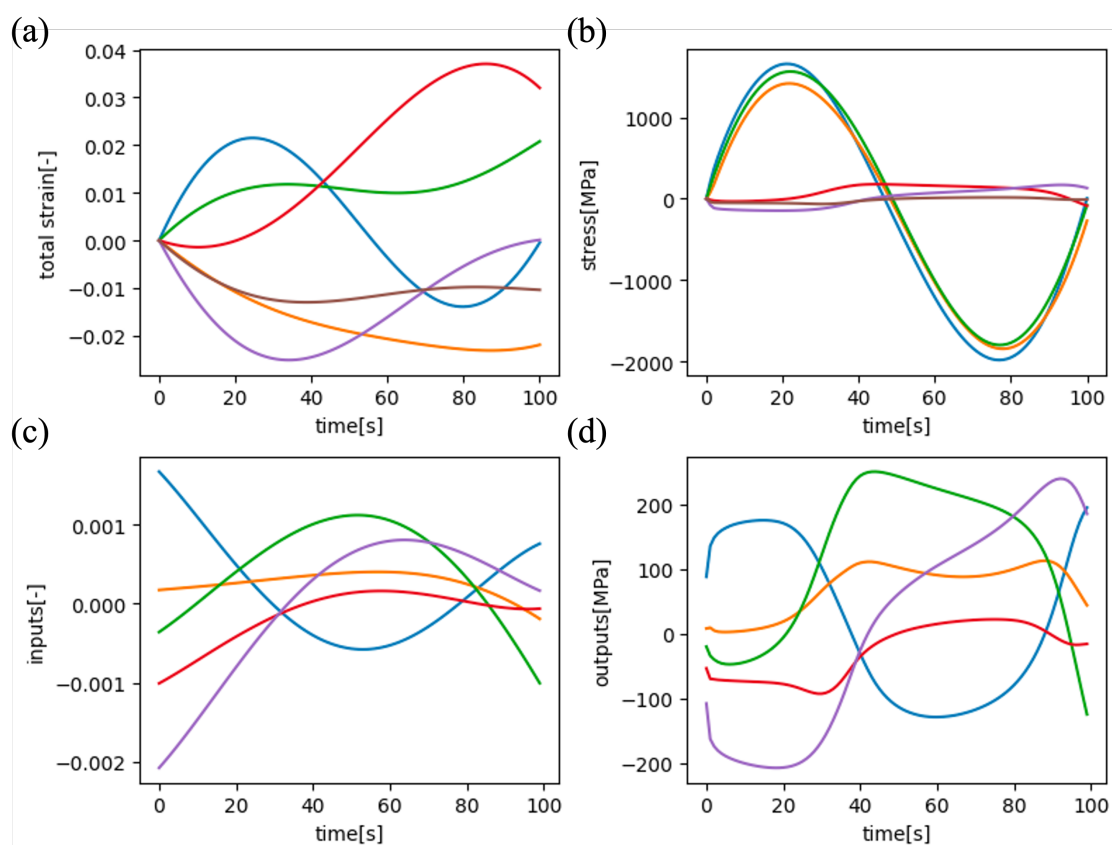


圖 32 資料集  $S$  之 (a) 應變、(b) 應力、(c) 模型輸入、(d) 模型輸出

斂的特性。此外，考慮到後續進行數據驅動多尺度模擬時，Abaqus UMAT 要求回傳材料勁度矩陣；以及另一方面，將模型輸出的一階導數納入訓練 (i.e., Sobolev training) 能夠有效提升模型預測力以及減少需要的訓練資料量 [46]，因此，模型的輸入輸出除了如式4.3的應變增量與應力外，本研究亦使用自動微分得到應力對應變的一階導數，即材料勁度矩陣，並納入損失函數中進行訓練。損失函數  $L$  定義為應力項損失  $L_\sigma$  與勁度項損失  $L_J$  的加權總和：

$$\begin{aligned}
 L &= L_\sigma + \lambda_J L_J \\
 &= MAE(\hat{y}, y) + MAE(\hat{J}, J) \\
 &= \frac{1}{I} \frac{1}{K_y} \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^{K_y} \left| \hat{y}_k^{(i)} - y_k^{(i)} \right| + \lambda_J \frac{1}{I} \frac{1}{K_J} \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^{K_J} \left| \hat{J}_k^{(i)} - J_k^{(i)} \right|
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

其中， $\lambda_J$  為加權權重；上標  $\hat{\cdot}$  代表模型輸出的變數； $J$  為材料勁度矩陣，遵循 Voigt notation 寫為 36 維度的向量。

表 8 訓練參數整理

| Parameter          | Value           |
|--------------------|-----------------|
| optimizer (opt)    | Ranger          |
| opt core           | MADGRAD         |
| learning rate (lr) | 0.001           |
| lr scheduler       | ReduceOnPlateau |
| factor             | 0.5             |
| patience           | 50              |
| min lr             | 0.0001          |
| loss function      | MAE             |
| $\lambda_J$        | 1.5             |
| batch size         | 2000            |
| epoch              | 5000            |

為了找到最佳的模型超參數，本研究以網格搜索法 (grid search) 分別訓練了 75 個模型，其中進行調整的超參數包括全連接層深度  $d = (1, 3, 5)$ 、全連接層神經元數量  $H_l = (8, 16, 32, 64, 128)$  以及狀態向量的特徵數量  $H_\chi = (8, 16, 32, 64, 128)$ 。模型均採用式4.5作為損失函數，其中將 batch size 設為 2000，學習率設為 0.001，

訓練 5000 個 epochs。訓練過程使用 ReduceOnPlateau 學習率調整器，隨著訓練的過程逐漸調降學習率至 0.0001，以穩定訓練過程。此外，各模型在訓練過程中，皆以模型在驗證資料集中的 MAE 作為評估指標，儲存 MAE 最小時的模型權重，避免過擬合的產生。其餘相關訓練參數均整理於表 8 中。

圖 33 為 75 個模型在訓練、驗證以及測試資料集的評估結果。觀察圖 33(a-c)，在訓練資料集中，模型預測誤差隨著模型深度  $d$ 、神經元數量  $H_l$  以及狀態變數  $H_x$  的增加而顯著下降。圖 33(d-f) 中顯示，在驗證資料集中，以參數  $(d, H_l, H_x) = (3, 32, 16)$  具有最小的預測誤差。此外，約以神經元數量  $32 \leq H_l \leq 64$  時模型誤差達到飽和，當  $H_l < 32$  時，模型預測誤差隨模型參數增加而顯著下降；反之，當  $H_l > 64$  時，模型預測誤差隨模型參數增加而上升，顯示模型過於複雜，導致模型對於訓練資料集的過擬合現象。而狀態變數  $H_x$  也表現出類似行為，在  $16 \leq H_x \leq 32$  時模型誤差達到飽和。測試資料集與驗證資料集相似，如圖 33(g-i) 所示，以參數  $(d, H_l, H_x) = (3, 32, 64)$  具有最小的預測誤差，並且以神經元數量  $32 \leq H_l \leq 64$  時為最佳，模型誤差趨於飽和。考量到模型在驗證資料集與測試資料集的準確度、泛用性，以及模型的參數數量，本研究選定超參數  $(d, H_l, H_x) = (3, 32, 32)$  以進行後續的討論。

#### 4.1.3 結果與討論

圖 34(a-b) 以及圖 34(c-d) 分別為代理材料模型在驗證資料集  $S$  以及驗證資料集  $R$  中的預測結果，其中皆以 4.3 中模型輸出  $y$  的形式表示。圖 34(a) 與 (c) 顯示代理材料模型在驗證資料集  $S$  以及驗證資料集  $R$  中預測誤差最小的樣本，在整個變形過程中，代理材料模型均能幾乎完美的捕捉材料的變形行為，並且在彈塑性轉變段以及應力轉折處均能良好的貼合模擬結果。圖 34(b) 與 (d) 為代理材料模型在驗證資料集  $S$  以及驗證資料集  $R$  中預測誤差最大的樣本，其中可以發現，

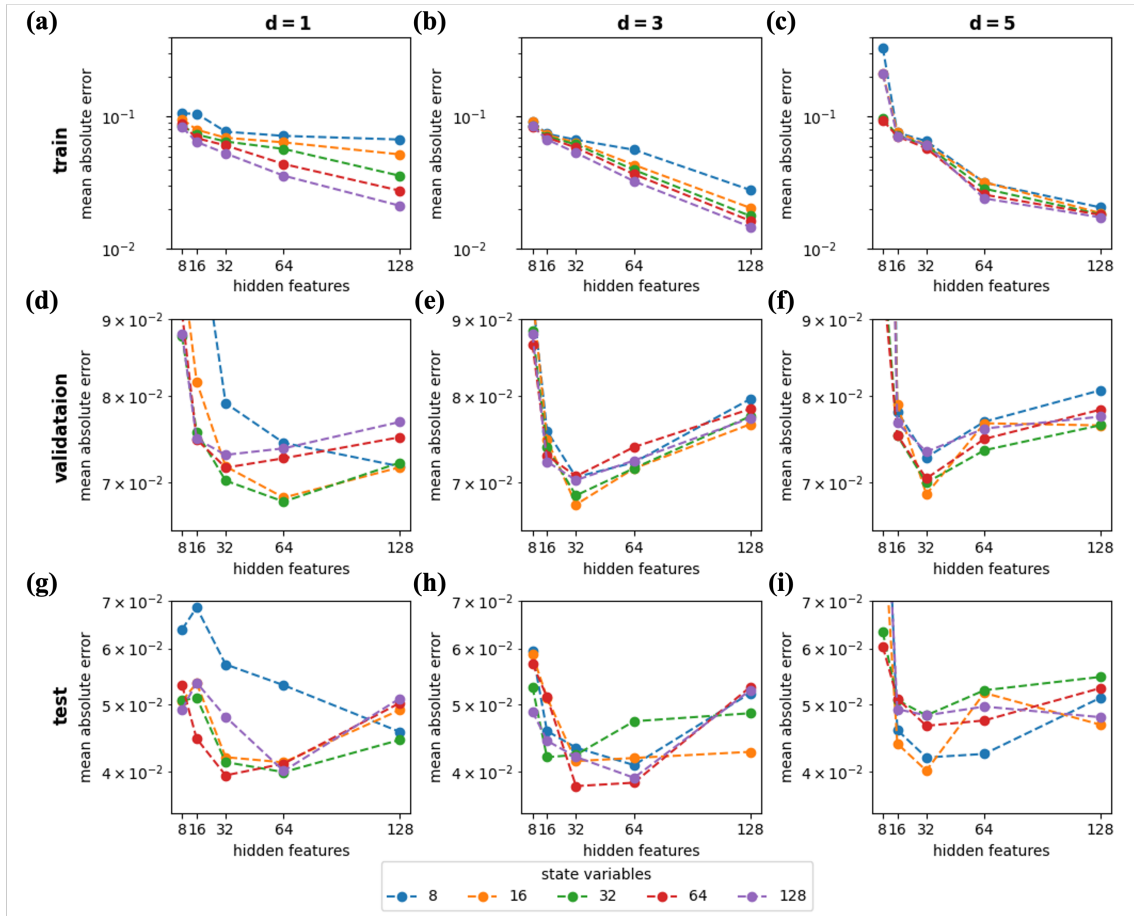


圖 33 模型在各種超參數組合下之預測性能 (a-c) 訓練資料集 (d-f) 驗證資料集 (g-i) 測試資料集

在變形的初始階段約時間小於 10s 前，代理材料模型尚能良好的捕捉材料的變形行為。然而，隨著變形時間的增加，代理材料模型僅能捕捉到各個應力分量的變化趨勢，且在應力轉折處具有較大的預測誤差。代理材料模型隨變形時間的預測誤差如圖 34(e) 中所示，在兩種驗證資料集中，預測誤差均隨模擬時間逐漸增加，並且在材料塑性變形啟動的初始階段，材料行為較為複雜時，誤差些微上升，此外，在變形速率較快的驗證資料集  $R$  中，代理材料模型具有相較於驗證資料集  $S$  較大的平均預測誤差。

在資料集  $S$  以及資料集  $R$  的變形路徑之外，圖 35(a-b) 分別顯示， $x$  方向的單軸拉伸以及  $xy$  方向的簡單剪接變形的應力應變曲線。如圖所示，儘管代理材料模型僅訓練於隨時間任意變化變形方向的複雜變形路徑下，其在單軸拉伸以及簡單剪切變形中亦能良好的預測材料的變形行為。然而，如圖 36 所示，代理材料模型在非主要變形方向上的應力分量預測結果有較大的相對誤差。以  $xy$  方向的簡單剪切變形為例，圖 36 比較了代理材料模型與模擬得到的六個柯西應力分量，其中除了主要變形方向 ( $xy$  方向) 外，代理材料模型均僅能捕捉材料行為的趨勢，並且隨著變形時間增加，誤差也隨之增加。此現象顯示了在泛用性上，代理材料模型雖能很好的捕捉主要變形方向的變形行為，但對於變形量較小的非主要變形方向，代理材料模型較難以精確的捕捉其材料變形行為。

## 4.2 數據驅動多尺度模擬

在前段小節中，代理材料模型的輸入與輸出僅針對應變增量與應力的軸差項進行訓練以及預測，然而，Abaqus UMAT 在每一個時間迭代的輸入為對數應變增量  $\Delta\epsilon$ ，輸出則要求回傳柯西應力  $\sigma$  以及等效材料勁度矩陣  $J$ ，因此在 Abaqus UMAT+Pytorch 的計算框架中進行數據驅動多尺度模擬尚需要進行額外的計算轉換，其完整計算過程整理於演算法 1 中。



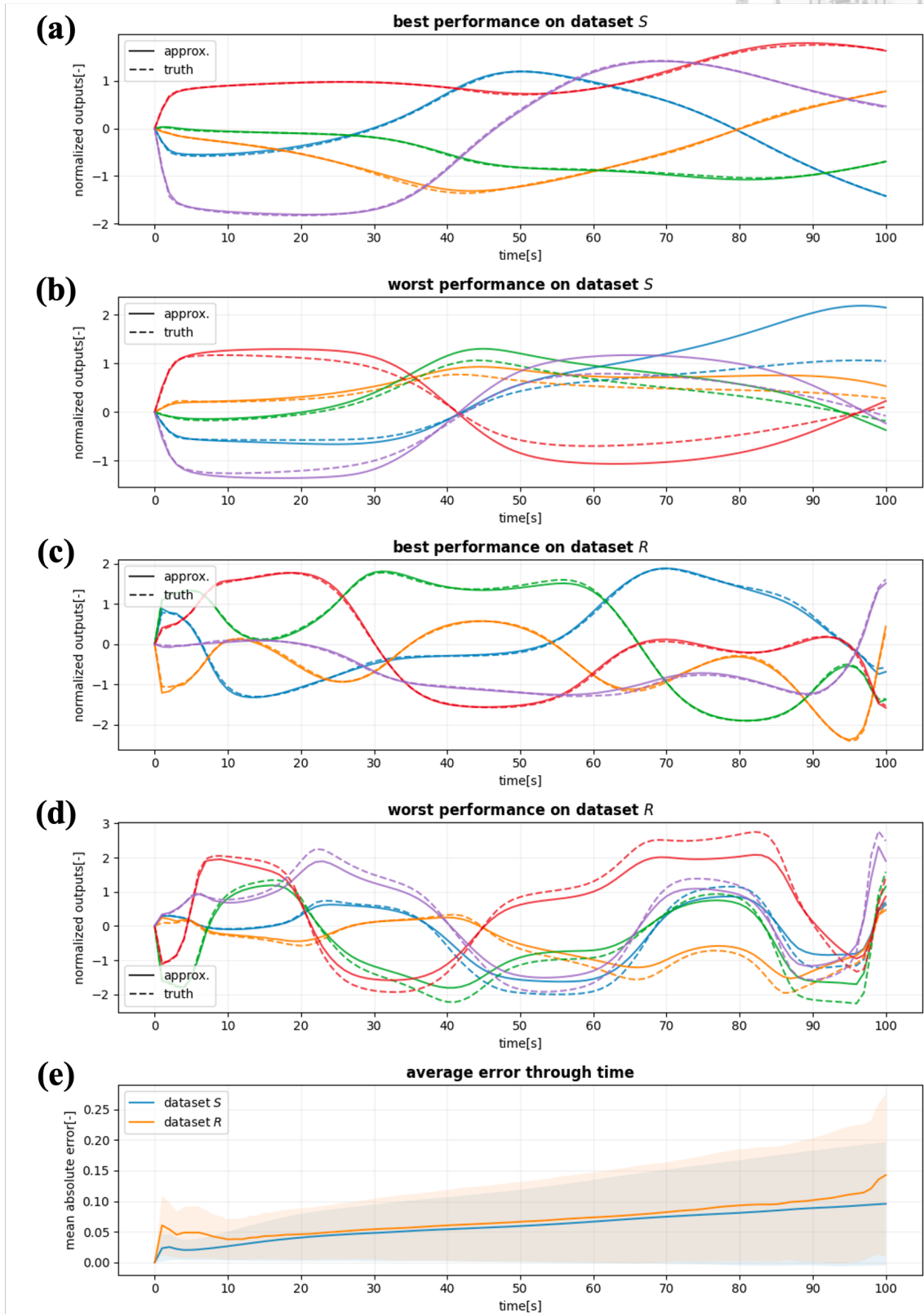


圖 34 驗證資料集中模型預測之最佳與最差結果 (a-b) 資料集 S (c-d) 資料集 R (e) 預測誤差隨時間序列之關係



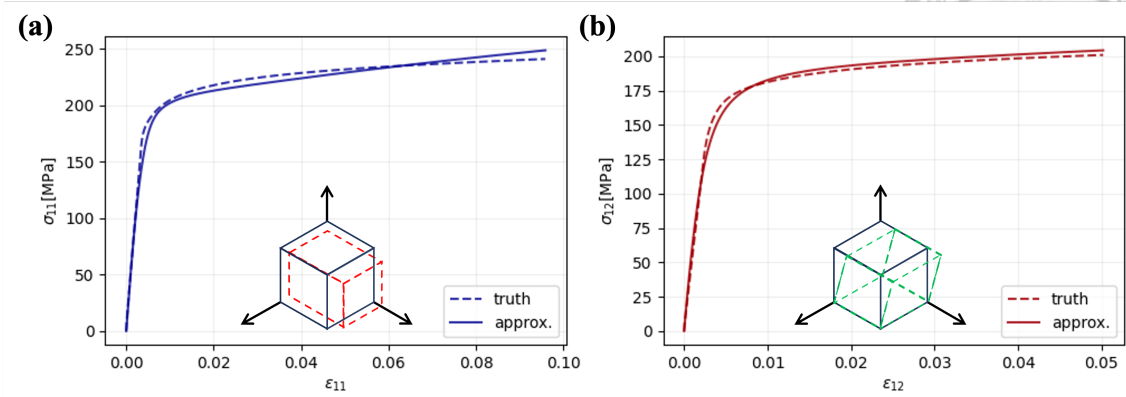


圖 35 測試資料集中模型預測結果 (a) 單軸拉伸 (b) 簡單剪切變形

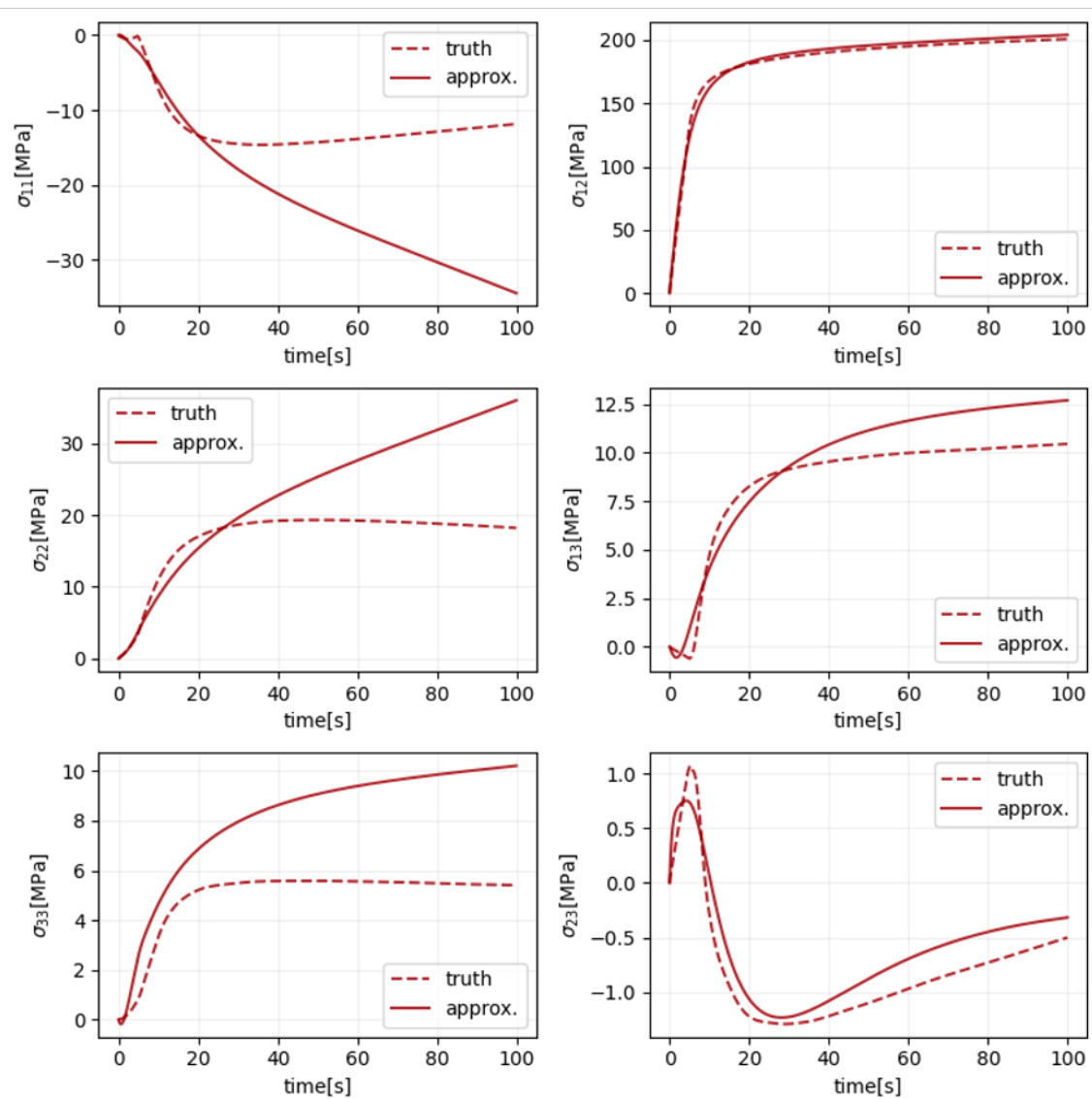


圖 36 簡單剪切變形中各應力分量之模型預測結果



---

**Algorithm 1:** Overview of Abaqus UMAT+Pytorch algorithm

---

```
1 Given:  $\Delta\epsilon^{(i)}, \chi^{(i-1)}$ 
2 Result:  $\chi^{(i)}, \hat{\sigma}^{(i)}, \hat{J}^{(i)}$ 
3 while Newton iteration not converge do
4   substitute  $\Delta\epsilon^{(i)}$  into equation 4.3 to obtain  $x^{(i)}$ ;
5   forward prediction using surrogate model to obtain  $\hat{y}^{(i)}$ ;
6   solve deviatoric stress  $\hat{\sigma}_{dev}^{(i)}$  with  $tr(\hat{\sigma}_{dev}^{(i)}) = 0$  and equation 4.3;
7   compute hydrostatic stress  $\hat{\sigma}_{hyd}^{(i)}$  using equation 4.4;
8   update state variables  $\chi^{(i)}$ ;
9   update Cauchy stress  $\hat{\sigma}$  using equation 4.2;
10  update stiffness matrix  $\hat{J}$  with automatic differentiation;
11 end while
```

---

#### 4.2.1 單元素驗證

為了驗證 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架的正確性，本研究首先進行單元素模型模擬，並將其輸出結果與直接使用代理材料模型的輸出結果進行比較。單元素模型在巨觀尺度上僅包含單一 C3D8R 元素，在每個時間增量迭代中根據演算法1將巨觀材料點之應變增量作為邊界條件傳遞至代理材料模型中，進行應力和勁度矩陣的預測。由於 C3D8R 元素僅包含一個材料積分點，將巨觀變形邊界條件透過 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架傳入代理材料模型應等效於直接將其輸入代理材料模型中，因此兩者應得到相同的模擬結果。本研究從資料集  $R$  中選取一變形路徑，將其變形梯度根據週期性邊界條件轉換為單元素模型八個節點的位移量，在 Abaqus 中以節點位移控制邊界條件進行模擬。單元素驗證結果如圖37所示，單元素模型的輸出應力與代理材料模型的輸出應力一致，顯示 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架的正確性。

#### 4.2.2 懸臂樑彎曲模擬

為了展示本研究提出的數據驅動多尺度模擬計算架構在巨觀尺度上的應用，本研究設計一懸臂樑並以 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架進行彎曲模擬。如圖

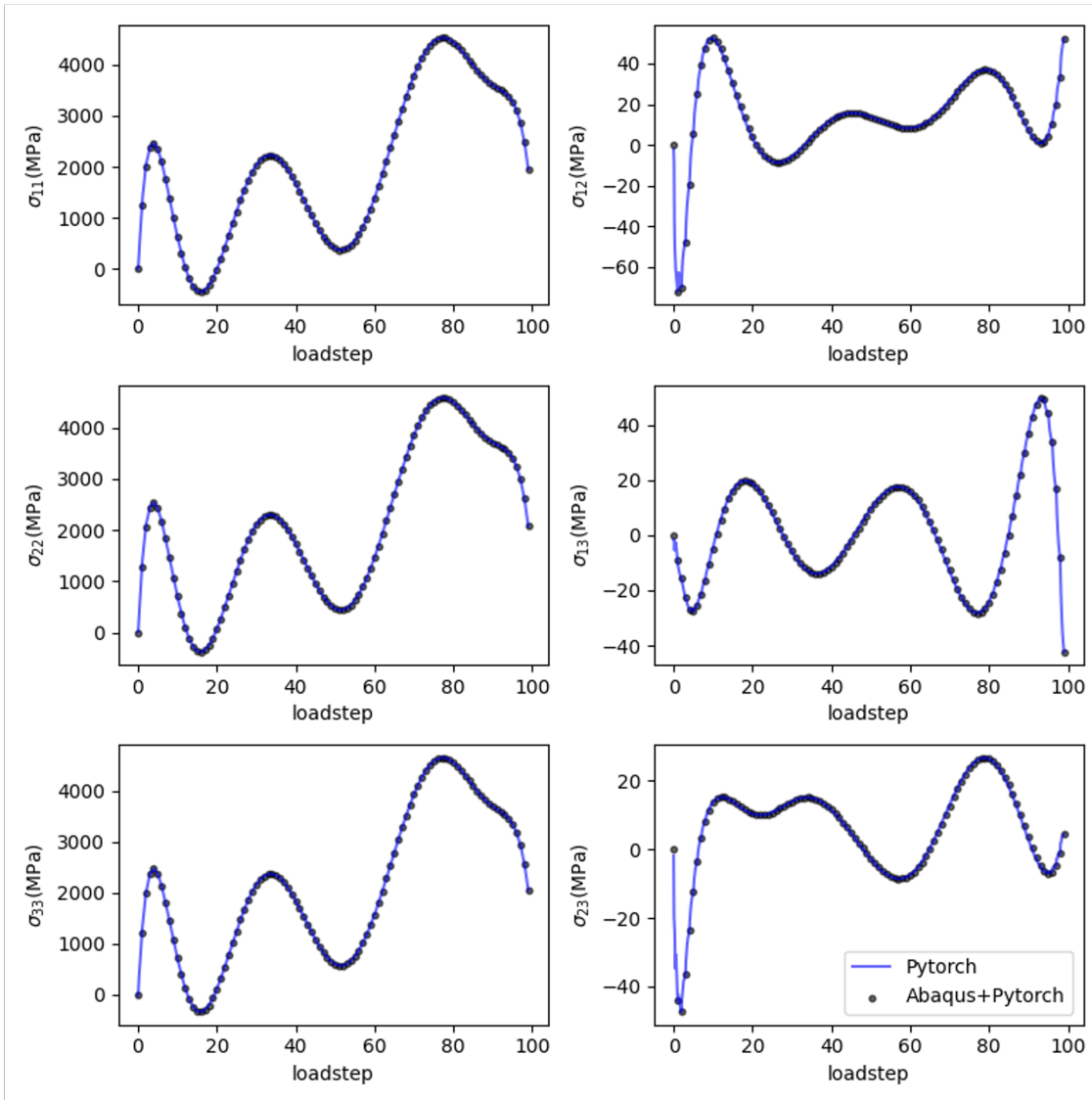


圖 37 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架單元素驗證結果

38(a) 所示，懸臂樑的尺寸為  $3mm \times 3mm \times 30mm$ ，並且由 2160 個 C3D8R 元素組成，其邊界條件以左端  $z=0$  處為固定端點，右端處則朝-y 軸方向施以 3mm 的位移。模擬過程中，時間步長以 0.001 為初始值，並隨後由 Abaqus 自動調整其大小。此處，為了討論不同訓練方法下，代理材料模型對於數據驅動多尺度模擬收斂性的影響，本研究以三種不同的代理材料模型分別進行模擬。三種代理材料模型包括”J model”，即以 4.1.2 小節中訓練參數進行訓練之模型；”Base model”，即令式 4.5 中  $\lambda_J = 0$  進行訓練之模型；”NAJ model”，即基於”J model”額外在訓練過程中於模型之狀態向量  $\chi^{(i)}$  人為添加介於  $[-3 \times 10^{-4}, 3 \times 10^{-4}]$  之隨機噪音，並且限制模型中的更新速率參數  $\alpha$  (式 2.61)，將其限制於 200 (i.e.,  $\tilde{\alpha} = 200$ )，詳見 [40]。

圖 38(b) 和 (c) 分別顯示”NAJ model”之 Von Mises 等效應力以及  $z$  方向柯西應力的模擬結果，在懸臂樑固定端點處的頂部以及底部，Von Mises 等效應力為約 330MPa；懸臂樑固定端點處的頂部柯西應力為約 325MPa，呈現拉應力；而懸臂樑固定端點處的底部柯西應力為約 -352MPa，呈現壓應力。圖 38(d) 為三種代理材料模型在模擬過程中的時間步長分析結果，三種模型中，”Base model”在第一個時間步迭代中即由於多次迭代不收斂，導致時間步長不斷減小至時間步長之最小值而停止模擬。另一方面，”J model”以及”NAJ model”則隨著模擬由時間步長初始值穩定增加至其最大值，並且持續至模擬結束。該收斂性分析結果顯示，儘管三種代理材料模型於訓練後在應力的預測上均表現出相似的性能，Sobolev training 能夠顯著的提升材料勁度矩陣的品質，並且大幅增加數據驅動多尺度模擬的收斂性。

### 4.2.3 狗骨頭單軸拉伸模擬

最後，本研究以 Abaqus UMAT+Pytorch 計算框架進行狗骨頭單軸拉伸模擬。狗骨頭模型的幾何尺寸取自文獻 [40]，由 3293 個 C3D8R 元素組成。模型的配

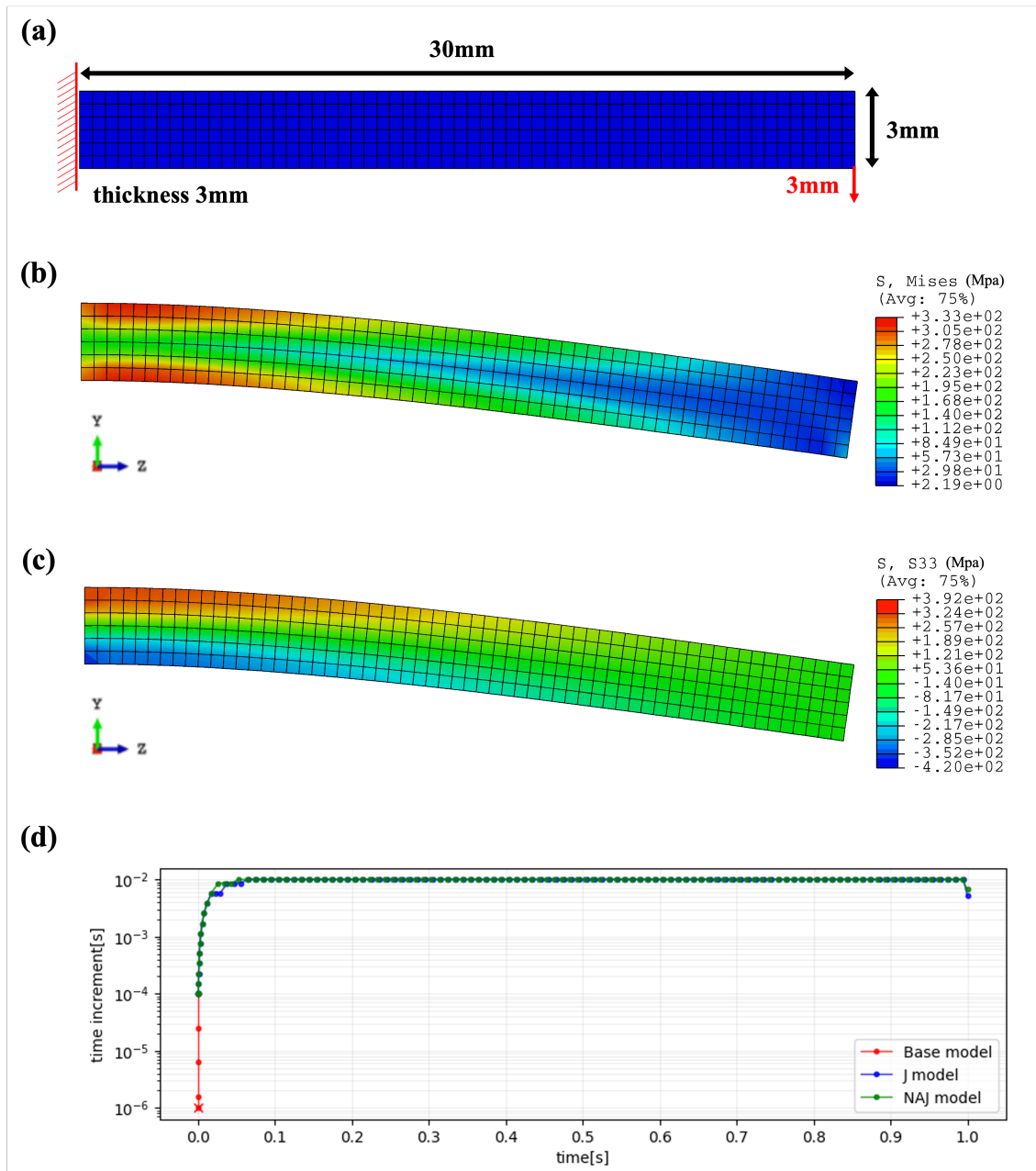


圖 38 懸臂樑彎曲模擬結果 (a) 模型尺寸與邊界條件配置 (b) Von Mises 應力 (c) z 方向柯西應力分量 (d) 收斂性分析

置如圖 39(a) 所示，其以左端  $y=0$  處為固定端點，並於試體右側向  $y$  軸方向施以 4mm 的位移，而其餘自由度均保持自由邊界條件。與前段小節中懸臂樑彎曲模擬相同，本研究以三種不同的模型分別進行模擬，並且模擬過程中，時間增量步以 0.001 為初始值，隨後由 Abaqus 自動調整時間增量步大小。

如圖 39(b) 所示為"NAJ model" 的模擬結果，其以  $y$  方向的柯西應力分量表示。圖 39(c) 顯示了三種代理材料模型在模擬過程中的時間步長分析結果，與懸臂樑彎曲模擬結果類似，"Base model" 在第一個時間步迭代中即由於多次迭代不收敛而中止模擬。另一方面，"J model" 與"NAJ model" 類似，在模擬時間約 0.4 秒前表現出穩定的收敛性，隨後於約 0.4 秒中止模擬。"NAJ model" 則維持較穩定的時間步長至模擬結束，其結果顯示，在包含較複雜幾何條件的模擬中，於代理材料模型訓練過程中添加人為噪音以及限制模型中的更新速率參數  $\alpha$  有助於更進一步的提高數據驅動多尺度模擬的收敛性。

#### 4.2.4 計算效率

表 9 整理了訓練代理材料模型以及三種多尺度模擬應用的運算時間，包括 3.2 小節中討論的 RVE 單軸拉伸模擬、4.2.2 小節中的懸臂樑彎曲模擬，以及 4.2.3 小節中的狗骨頭單軸拉伸模擬。在多尺度模擬運算效率的測試中，針對 Abaqus FEM、DAMASK FFT 以及代理材料模型 RNN 三種求解器進行比較，其中 RNN-J 代表該測試中包含以自動微分計算代理材料模型一階導數的時間。進行測試的硬體環境為 Intel Xeon CPU(2.20GHz) 以及 NVIDIA GeForce RTX 2080 Ti GPU。由於在數據驅動多尺度模擬的環境中 Abaqus UMAT 會在每個時間增量步的迭代中被反覆呼叫，導致其較難以有效的利用 GPU 進行加速運算，因此代理材料模型僅於訓練時以 GPU 進行模型的參數更新，而表 9 中的測試除了 Abaqus FEM 以及 DAMASK FFT 使用 20 顆 CPU 核心外，均以單一 cpu 核心進行。此外，在

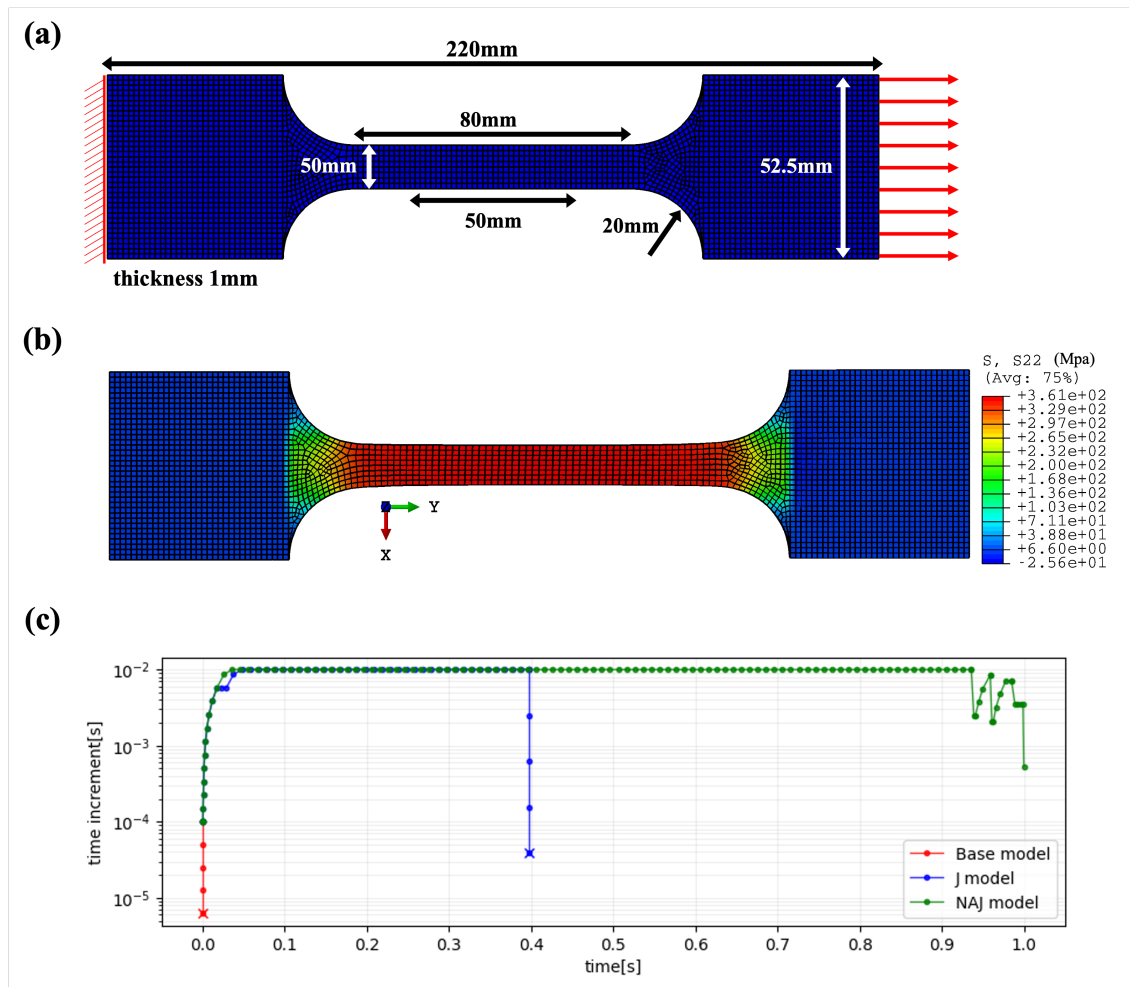


圖 39 狗骨頭單軸拉伸模擬結果 (a) 模型尺寸與邊界條件配置 (b) y 方向柯西應力分量 (c) 收斂性分析

懸臂樑彎曲以及狗骨頭單軸拉伸模擬中，Abaqus FEM+DAMASK FFT 的測試結果為估計數值，其可由 Abaqus FEM 中的巨觀積分點數量、迭代次數以及 DAMASK FFT 在 RVE 單軸拉伸模擬中單次迭代的求解時間得到近似結果。

測試結果顯示，在 RVE 單軸拉伸模擬中，雖 DAMASK FFT 相較於 Abaqus FEM 的求解效率能夠增進約 10 倍以上，然而若將其結合巨觀 FEM 進行多尺度模擬，仍具有相當可觀的運算成本，並且隨著巨觀材料點的增加，其運算成本將逐漸增長至無法負荷。而代理材料模型經訓練完畢後的線上推論效率相較於 DAMASK FFT 約能夠進一步增進 1000 倍以上，在懸臂樑彎曲的多尺度模擬中僅花費約 15 分鐘；狗骨頭單軸拉伸的多尺度模擬僅花費 3.8 小時即完成運算。此外，本測試結果中代理材料模型僅使用 CPU 進行運算，若能夠妥善針對 GPU 運算進行優化將能夠更進一步的減少運算成本。

表 9 多尺度模擬計算效率

| problem                                                               | solver                                       | wall clock time(s)   |
|-----------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|----------------------|
| surrogate model training<br>(one time)                                | RNN (1gpu)                                   | $1.4 \times 10^4$    |
|                                                                       | RNN-J (1gpu)                                 | $2.9 \times 10^4$    |
| RVE uniaxial tensile test<br>(8000 elements)                          | Abaqus FEM (20cpus)                          | $4.7 \times 10^3$    |
|                                                                       | DAMASK FFT (20cpus)                          | $2.3 \times 10^2$    |
|                                                                       | RNN (1cpu)                                   | $1.6 \times 10^{-2}$ |
|                                                                       | RNN-J (1cpu)                                 | $4.9 \times 10^{-1}$ |
| Concurrent multiscale,<br>cantilever beam bending<br>(2160 elements)  | Abaqus FEM+DAMASK FFT<br>(1cpu+20cpus, est.) | $4.2 \times 10^5$    |
| Concurrent multiscale,<br>cantilever beam bending<br>(2160 elements)  | Abaqus FEM+RNN-J (1cpu)                      | $9.0 \times 10^2$    |
| Concurrent multiscale,<br>dogbone uniaxial tensile<br>(3293 elements) | Abaqus FEM+DAMASK FFT<br>(1cpu+20cpus, est.) | $1.1 \times 10^6$    |
| Concurrent multiscale,<br>dogbone uniaxial tensile<br>(3293 elements) | Abaqus FEM+RNN-J (1cpu)                      | $1.4 \times 10^4$    |





### 4.3 小結

本章節首先討論了代理材料模型的訓練方法，接著，為了使代理材料模型在訓練完畢後能夠預測任意的變形路徑，將其應用至數據驅動多尺度模擬中，本研究設計了包含兩種變形路徑的資料集，並根據材料的特性將代理材料模型的輸入以及輸出限定於應變增量以及應力的軸差項。在訓練方法中，本研究利用自動微分得到應力對應變的一階導數，即材料勁度矩陣，並且將其納入損失函數中進行訓練。訓練結果顯示代理材料模型在隨時間任意變化方向的複雜變形驗證資料集中能夠良好的捕捉材料變形行為，此外，針對單軸拉伸以及簡單剪切變形等，代理材料模型亦能捕捉到主要變形趨勢，顯示其具有一定的泛用性。

最後，本研究將訓練完畢的代理材料模型代入 Abaqus UMAT+Pytorch 數據多尺度模擬計算框架，並先以單元素模型驗證該計算框架的正確性，接著以該框架進行懸臂樑彎曲以及狗骨頭單軸拉伸數據驅動多尺度模擬。在兩個模擬的應用中，本研究提出的數據驅動多尺度模擬方法均能大幅度的提高約 100-1000 倍的運算效率，並且該框架在 GPU 加速運算方面仍具有相當的優化空間，能夠進一步的提高運算效率。



## 第五章 結論及未來展望

Al-Mg-Si 高強度鋁合金因其輕量的特性，近年來在汽車工業中受到高度重視。其研究通常圍繞於發展先進時效熱處理製程，控制其顯微析出物結構以增加材料強度，以及溫變形以增加其延展性。晶體塑性模型結合有限元素法 (CPFEM) 或快速傅立葉轉換法 (CPFFT) 不同於早期以簡化的均值化方法，能夠反映真實的材料晶粒間交互作用進行模擬，而結合析出動力模型能更進一步的即時更新析出物狀態，有利於更完整的分析鋁合金在各種溫度製程中的材料強度。另一方面，透過整合基於深度學習的代理材料模型，數據驅動多尺度模擬使得連結微結構的巨觀尺度模擬不再受到計算資源的限制，能夠將模擬分析尺度進一步貼近實際工程構件。以下將本研究之結論以及未來展望以條列式呈現。

### 5.1 結論

1. 本研究建立完整的多尺度材料模擬計算流程，包含分析 TEM 以及 EBSD 影像獲取鋁合金析出物以及晶體方位分佈參數，以及耦合晶體塑性模型以及析出動力模型並實作於 DAMASK 中，在模擬中能夠即時更新析出物狀態並反映至材料強度。
2. 析出動力模型能夠預測等溫時效條件下析出物成核、成長以及粗化的演變關係，並且在四個時效條件中準確的捕捉析出物之數量密度、平均半徑等參數。此外，模型中析出物的化學組成假設會大幅影響預測的體積分率，而析出物的形狀假設則會影響其預測之粗化速率。
3. 降伏強度模型能夠準確的捕捉在常溫拉伸下隨時效時間增加，析出物平均半徑以及數量密度變化造成的降伏強度變化趨勢。另一方面，加工硬化模型透

過 SSD 與 GND 的機制，能夠描述四種時效條件下的不同加工硬化行為。此外，升溫拉伸模擬中，模型亦能捕捉因升溫差排動態回復效應增加而造成的降伏強度下降，惟在溫度較高時傾向高估材料強度，尚須進一步深入探討。

4. 本研究亦建立完整的數據驅動多尺度材料模擬計算流程，包含訓練資料集的產生、基於深度學習之代理材料模型的訓練，以及將訓練完畢的模型快速部署至 Abaqus UMAT。
5. 本研究訓練基於循環神經網路的代理材料模型，能夠準確的預測任意變形路徑下的材料應力響應，並且在訓練資料集外的變形路徑預測上仍能保持較低的誤差，具有一定的泛用性。在懸臂樑彎曲以及狗骨頭單軸拉伸的模擬中，數據驅動多尺度模型相較於 DNS 模型能夠提升約 100-1000 倍的運算效率。

## 5.2 未來展望

1. 本研究中使用之析出動力模型假設析出物為球狀，並且化學組成為  $Mg_2Si$ ，發展符合真實析出物形狀以及化學組成的析出動力模型應能增進模型預測之準確性以及可解釋性。
2. 本研究中僅包含尖峰時效後的實驗數據，模型尚須針對初時效的析出物數、材料強度等進行驗證，並且，模型亦須針對高溫變形下的材料行為做進一步的探討。此外，初時效之條件配合高溫變形應較能深入探討 S 模型以及 NS 模型。
3. 代理材料模型目前僅針對單一微結構進行訓練，因此若微結構改變則需重新訓練模型。將卷積神經網路 (CNN) 或圖神經網路 (GNN) 結合目前的 RNN 模型應能使代理材料模型將微結構資訊納入考量。此外，產生訓練資料集時，微結構、變形路徑等變因構成龐大的搜索空間，使模型需要大量的訓練

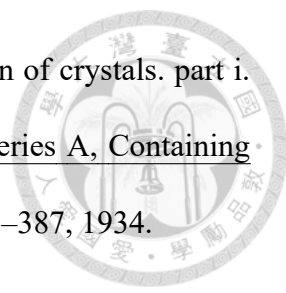
資料才能進行訓練，其應能透過主動學習 (active learning) 等技術減少代理材料模型所需要的訓練資料數量。





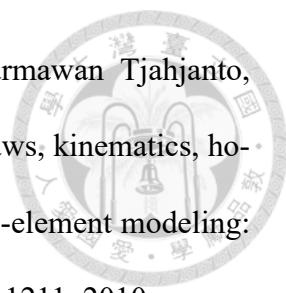
## 參考文獻

- [1] Tianyu Huang. Data-Driven Uncertainty Quantification and Multi-Domain Design Integration in Integrated Computational Materials Engineering (ICME). PhD thesis, Northwestern University, 2020.
- [2] Haiming Zhang, Martin Diehl, Franz Roters, and Dierk Raabe. A virtual laboratory using high resolution crystal plasticity simulations to determine the initial yield surface for sheet metal forming operations. International Journal of Plasticity, 80:111–138, 2016.
- [3] 黃仲偉, 吳泓錡, 張慰慈, 鄭翊良, 楊文嘉, 游濟華, and 陳俊杉. 實現自己的材料庫: Abaqus UMAT 於計算力學之應用. 國立臺灣大學出版中心, 2022.
- [4] OR Myhr, Ø Grong, and SJ Andersen. Modelling of the age hardening behaviour of al–mg–si alloys. Acta Materialia, 49(1):65–75, 2001.
- [5] OR Myhr and Øystein Grong. Modelling of non-isothermal transformations in alloys containing a particle distribution. Acta Materialia, 48(7):1605–1615, 2000.
- [6] 鄭翊良. 以差排密度之強化晶體塑性模型分析鋁合金之析出硬化. 2020.
- [7] Duancheng Ma. Crystal plasticity in metal forming simulation: Current status and future directions. 2014.
- [8] Robert J Asaro. Crystal plasticity. 1983.

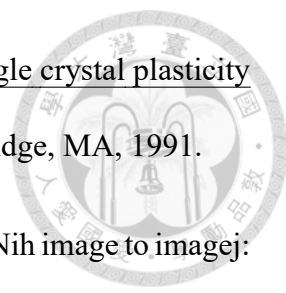
- 
- [9] Geoffrey Ingram Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. part i. —theoretical. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 145(855):362–387, 1934.
- [10] H Mecking and UF Kocks. Kinetics of flow and strain-hardening. Acta metallurgica, 29(11):1865–1875, 1981.
- [11] Ole Runar Myhr, Øystein Grong, and Ketill Olav Pedersen. A combined precipitation, yield strength, and work hardening model for al-mg-si alloys. Metallurgical and Materials Transactions A, 41:2276–2289, 2010.
- [12] Sadik L Omairey, Peter D Dunning, and Srinivas Sriramula. Development of an abaqus plugin tool for periodic rve homogenisation. Engineering with Computers, 35(2):567–577, 2019.
- [13] Franz Roters, Martin Diehl, Pratheek Shanthraj, Philip Eisenlohr, C Reuber, Su Leen Wong, Tias Maiti, Alireza Ebrahimi, Thomas Hochrainer, H-O Fabritius, et al. Damask—the düsseldorf advanced material simulation kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale. Computational Materials Science, 158:420–478, 2019.
- [14] Ole Runar Myhr, Odd Sture Hopperstad, and Tore Børvik. A combined precipitation, yield stress, and work hardening model for al-mg-si alloys incorporating the effects of strain rate and temperature. Metallurgical and Materials Transactions A, 49(8):3592–3609, 2018.
- [15] Fengbo Han, Franz Roters, and Dierk Raabe. Microstructure-based multiscale modeling of large strain plastic deformation by coupling a full-field crystal plasticity-

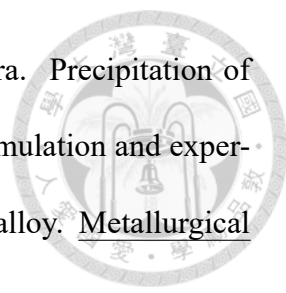
spectral solver with an implicit finite element solver. International Journal of Plasticity, 125:97–117, 2020.

- 
- [16] Wei Dai, Huamiao Wang, Qiang Guan, Dayong Li, Yinghong Peng, and Carlos N Tomé. Studying the micromechanical behaviors of a polycrystalline metal by artificial neural networks. Acta Materialia, 214:117006, 2021.
- [17] Usman Ali, Waqas Muhammad, Abhijit Brahme, Oxana Skiba, and Kaan Inal. Application of artificial neural networks in micromechanics for polycrystalline metals. International Journal of Plasticity, 120:205–219, 2019.
- [18] M Mozaffar, R Bostanabad, W Chen, K Ehmann, Jian Cao, and MA Bessa. Deep learning predicts path-dependent plasticity. Proceedings of the National Academy of Sciences, 116(52):26414–26420, 2019.
- [19] Filippo Masi, Ioannis Stefanou, Paolo Vannucci, and Victor Maffi-Berthier. Thermodynamics-based artificial neural networks for constitutive modeling. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 147:104277, 2021.
- [20] Colin Bonatti and Dirk Mohr. One for all: Universal material model based on minimal state-space neural networks. Science Advances, 7(26):eabf3658, 2021.
- [21] Colin Bonatti and Dirk Mohr. On the importance of self-consistency in recurrent neural network models representing elasto-plastic solids. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 158:104697, 2022.
- [22] Burigede Liu, Nikola Kovachki, Zongyi Li, Kamyar Azizzadenesheli, Anima Anandkumar, Andrew M Stuart, and Kaushik Bhattacharya. A learning-based multiscale method and its application to inelastic impact problems. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 158:104668, 2022.

- 
- [23] Franz Roters, Philip Eisenlohr, Luc Hantcherli, Denny Dharmawan Tjahjanto, Thomas R Bieler, and Dierk Raabe. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. Acta materialia, 58(4):1152–1211, 2010.
- [24] JFW Bishop and Rodney Hill. Cxxviii. a theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face-centred metal. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 42(334):1298–1307, 1951.
- [25] Feng Lu, Jonas K Sunde, Calin D Marioara, Randi Holmestad, and Bjørn Holmedal. An improved modelling framework for strength and work hardening of precipitate strengthened al–mg–si alloys. Materials Science and Engineering: A, 832:142500, 2022.
- [26] WJ Poole\*, X Wang, DJ Lloyd, and JD Embury. The shearable–non-shearable transition in al–mg–si–cu precipitation hardening alloys: implications on the distribution of slip, work hardening and fracture. Philosophical Magazine, 85(26-27):3113–3135, 2005.
- [27] Ole Runar Myhr, Øystein Grong, and Carmen Schäfer. An extended age-hardening model for al-mg-si alloys incorporating the room-temperature storage and cold deformation process stages. Metallurgical and Materials Transactions A, 46:6018–6039, 2015.
- [28] Aude Simar, Yves Bréchet, B De Meester, A Denquin, and Thomas Pardoen. Sequential modeling of local precipitation, strength and strain hardening in friction stir welds of an aluminum alloy 6005a-t6. Acta Materialia, 55(18):6133–6143, 2007.



- 
- [29] Yonggang Huang. A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program. Harvard Univ. Cambridge, MA, 1991.
- [30] Caroline A Schneider, Wayne S Rasband, and Kevin W Eliceiri. Nih image to imagej: 25 years of image analysis. Nature methods, 9(7):671–675, 2012.
- [31] Michael A Groeber and Michael A Jackson. Dream. 3d: a digital representation environment for the analysis of microstructure in 3d. Integrating materials and manufacturing innovation, 3:56–72, 2014.
- [32] DD Tjahjanto, P Eisenlohr, and F Roters. A novel grain cluster-based homogenization scheme. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18(1):015006, 2009.
- [33] David E Rumelhart, Geoffrey E Hinton, and Ronald J Williams. Learning internal representations by error propagation. Technical report, California Univ San Diego La Jolla Inst for Cognitive Science, 1985.
- [34] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. Long short-term memory. Neural computation, 9(8):1735–1780, 1997.
- [35] Neerad Phansalkar, Sumit More, Ashish Sabale, and Madhuri Joshi. Adaptive local thresholding for detection of nuclei in diversity stained cytology images. In 2011 International conference on communications and signal processing, pages 218–220. IEEE, 2011.
- [36] O Engler, CD Marioara, Y Aruga, M Kozuka, and OR Myhr. Effect of natural ageing or pre-ageing on the evolution of precipitate structure and strength during age hardening of al–mg–si alloy aa 6016. Materials Science and Engineering: A, 759:520–529, 2019.

- 
- [37] Qiang Du, Bjørn Holmedal, Jesper Friis, and Calin D Marioara. Precipitation of non-spherical particles in aluminum alloys part ii: numerical simulation and experimental characterization during aging treatment of an al-mg-si alloy. Metallurgical and Materials Transactions A, 47:589–599, 2016.
- [38] LM Cheng, WJ Poole, JD Embury, and DJ Lloyd. The influence of precipitation on the work-hardening behavior of the aluminum alloys aa6111 and aa7030. Metallurgical and Materials Transactions A, 34:2473–2481, 2003.
- [39] MF Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics, 21(170):399–424, 1970.
- [40] Colin Bonatti, Bekim Berisha, and Dirk Mohr. From cp-fft to cp-rnn: Recurrent neural network surrogate model of crystal plasticity. International Journal of Plasticity, 158:103430, 2022.
- [41] Less Wright and Nestor Demeure. Ranger21: a synergistic deep learning optimizer. arXiv preprint arXiv:2106.13731, 2021.
- [42] Ilya Loshchilov and Frank Hutter. Decoupled weight decay regularization. arXiv preprint arXiv:1711.05101, 2017.
- [43] Aaron Defazio and Samy Jelassi. Adaptivity without compromise: a momentumized, adaptive, dual averaged gradient method for stochastic optimization. J Mach Learn Res, 23:1–34, 2022.
- [44] Michael Zhang, James Lucas, Jimmy Ba, and Geoffrey E Hinton. Lookahead optimizer: k steps forward, 1 step back. Advances in neural information processing systems, 32, 2019.

[45] Liyuan Liu, Haoming Jiang, Pengcheng He, Weizhu Chen, Xiaodong Liu, Jianfeng Gao, and Jiawei Han. On the variance of the adaptive learning rate and beyond. arXiv preprint arXiv:1908.03265, 2019.

[46] Wojciech M Czarnecki, Simon Osindero, Max Jaderberg, Grzegorz Swirszcz, and Razvan Pascanu. Sobolev training for neural networks. Advances in neural information processing systems, 30, 2017.

