



## Investigating the effect of cutting speed and cutting depth parameters on nickel-iron-chromium alloy nanomachining by response surface method with the help of molecular dynamics simulation

Mojtaba Zolfaghari <sup>a\*</sup>, Hamed Heydari <sup>b</sup>, Mohammad Javad Ghasemi <sup>a</sup>, Vahid Tahmasbi <sup>d</sup>

<sup>a</sup> Department of Mechanical Engineering, Arak University, Arak, Iran

<sup>b</sup> Department of Mechanical Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

<sup>d</sup> Department of Mechanical Engineering, Arak University of Technology, Arak, Iran

### Original Article

Use your device to scan and read the article online



**Citation:** Zolfaghari M, Heydari H, Ghasemi M J, Tahmasbi V. Investigating the effect of cutting speed and cutting depth parameters on nickel-iron-chromium alloy nanomachining by response surface method with the help of molecular dynamics simulation Mechanics of Advanced and Smart Materials. 2025;5(3):342-365.

doi <https://10.66224/masm.5.3.342>

### KEYWORDS

Nano-machining,  
Polycrystalline alloy,  
Molecular dynamics,  
Nickel-iron-chromium,  
Response surface method.

### ABSTRACT

Ultra-precision machining refers to the process of manufacturing very high-precision parts that are required in industries such as aerospace, medicine, optics, and electronics, where nanometer tolerances, fine surface coatings, and precise geometries are essential. In this research, the nano-machining process of polycrystalline nickel-iron-chromium alloy has been investigated using the molecular dynamics method. Investigating the effects of cutting speed and cutting depth parameters on this process by the response surface method shows that by reducing the cutting speed from 400 to 10 m/s, the cutting depth from 5 to 0.5 nm, the values of cutting forces, normal forces and the Von Mises stress of the workpiece decrease by 65.9, 23.4 and 25.58 percent, respectively. When the cutting depth was set to 0.5 nm and the cutting speed was 10 m/s, the temperature reached 308.82 K. At this state, the machining forces—including cutting forces and Thrust force —were measured at 152.42 and 221.2 (eV/n), respectively. This configuration minimizes the machining forces, resulting in an optimized state for the machining process. The investigation of structural changes using the radial distribution function shows that increasing the cutting speed from 10 m/s to 400 m/s, while maintaining a cutting depth of 2.75 nm, results in an increase of 10 units in the radial distribution function. This change has contributed to the structural alterations of the workpiece.

### Extended Abstract

#### 1. Introduction

Nanomachining of nickel-based superalloys is essential for enhancing their mechanical properties, optimizing their microstructure, achieving high precision and surface quality, and enabling compatibility with advanced manufacturing techniques. These benefits contribute to the development of high-

\* Corresponding author: Mojtaba Rahimi; Tel.: +988632625704

E-mail address: [m-zolfaghari@araku.ac.ir](mailto:m-zolfaghari@araku.ac.ir)

DOI: <https://10.66224/masm.5.3.342>

Received: December 20, 2024; Received in revised form: January 15, 2025; Accepted: February 22, 2025.

© Author



performance components for industries such as aerospace, energy, and automotive, where reliability and performance are of utmost importance [1]. Doan et al. conducted a study on the nano machining of a NiFeCo alloy using molecular dynamics methods. They demonstrated that increasing the machining speed, the depth of chip removal, and the radius of the machining tool resulted in higher force, greater chip volume, and elevated temperatures [2]. Hao conducted an investigation into the nano-cutting of a nickel-based monocrystalline alloy using a silicon nitride ceramic tool through molecular dynamics simulations. They found that increasing the cutting speed resulted in higher hydrostatic stress, increased crystal energy, and elevated cutting temperatures. As a result, the changes in the crystal lattice structure and the rate of phase transformations became more pronounced [3].

This research focuses on the molecular dynamics simulation of the nano-machining process for the Ni<sub>18</sub>Fe<sub>8</sub>Cr alloy. After obtaining results from the molecular dynamics method, we analyzed and investigated these results to develop a suitable regression equation. This equation examines how cutting speed and cutting depth affect the force, temperature, and stress parameters during the nanomachining process. The response surface method was employed for this analysis.

## 2. Methodology

An overview of the parameters, tool geometry, and workpiece involved in the nanomachining process is presented in Figure 1. The geometric modeling consists of two components. The first component is a polycrystalline nickel-based alloy workpiece made of nickel, iron, and chromium, which has a lattice constant of 10.3596 angstroms. The second component is a diamond cutting tool structured in a cubic diamond arrangement, with a lattice constant of 3.567 angstroms.

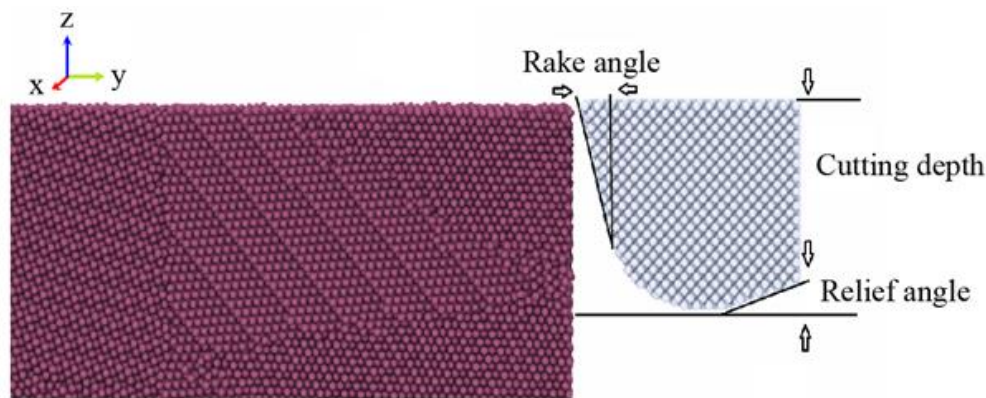


Figure 1. A view of machined components.

In this research, the Embedded-Atom Method (EAM) potential function is utilized to model the interactions between atoms within the workpiece. For the interactions between the tool and the workpiece, Morse's potential function is applied. Additionally, the interactions among the carbon atoms in the structure of the tool are disregarded, and they are considered to be rigid.

## 3. Design of experiment

The input factors for the experiment are cutting speed and cutting depth. The output measurements include machining force, hydrostatic stress, von Mises stress, and temperature. The design of experiment was created using Design Expert software employing the central composite method.

Table 1. Design of experiment

| No. | Cutting speed (m/s) | Cutting depth (nm) |
|-----|---------------------|--------------------|
| 1   | 400                 | 5                  |
| 2   | 205                 | 5                  |
| 3   | 400                 | 0.5                |
| 4   | 10                  | 5                  |
| 5   | 10                  | 0.5                |
| 6   | 205                 | 2.75               |
| 7   | 400                 | 2.75               |
| 8   | 10                  | 2.75               |
| 9   | 205                 | 0.5                |

#### 4. Response surface methodology

Table 2. Results of the Simulation

| No. | Cutting speed (m/s) | Cutting depth (nm) | Cutting force (eV/n) | Thrust force (eV/n) | Hydrostatic stress (GPa) | Von Mises stress (GPa) | Surface temperature (°K) |
|-----|---------------------|--------------------|----------------------|---------------------|--------------------------|------------------------|--------------------------|
| 1   | 400                 | 5                  | 447.49               | 289                 | 3.96                     | 4.31                   | 775.68                   |
| 2   | 400                 | 2.75               | 335.46               | 302.97              | 3.77                     | 4.30                   | 595.03                   |
| 3   | 400                 | 0.5                | 134.80               | 271.69              | 3.04                     | 3.84                   | 493.03                   |
| 4   | 205                 | 0.5                | 116.23               | 255.02              | 2.45                     | 3.55                   | 451.74                   |
| 5   | 10                  | 5                  | 313.84               | 297.34              | 1.47                     | 3.78                   | 297.82                   |
| 6   | 205                 | 5                  | 321.99               | 274.94              | 3.52                     | 4.08                   | 605.70                   |
| 7   | 10                  | 2.75               | 281.72               | 246.51              | 1.47                     | 3.51                   | 303.47                   |
| 8   | 10                  | 0.5                | 152.42               | 221.20              | 1.51                     | 3.2                    | 308.82                   |
| 9   | 205                 | 2.75               | 272.85               | 269.88              | 3.28                     | 4.03                   | 494.75                   |

##### 4.1. Cutting force response surface

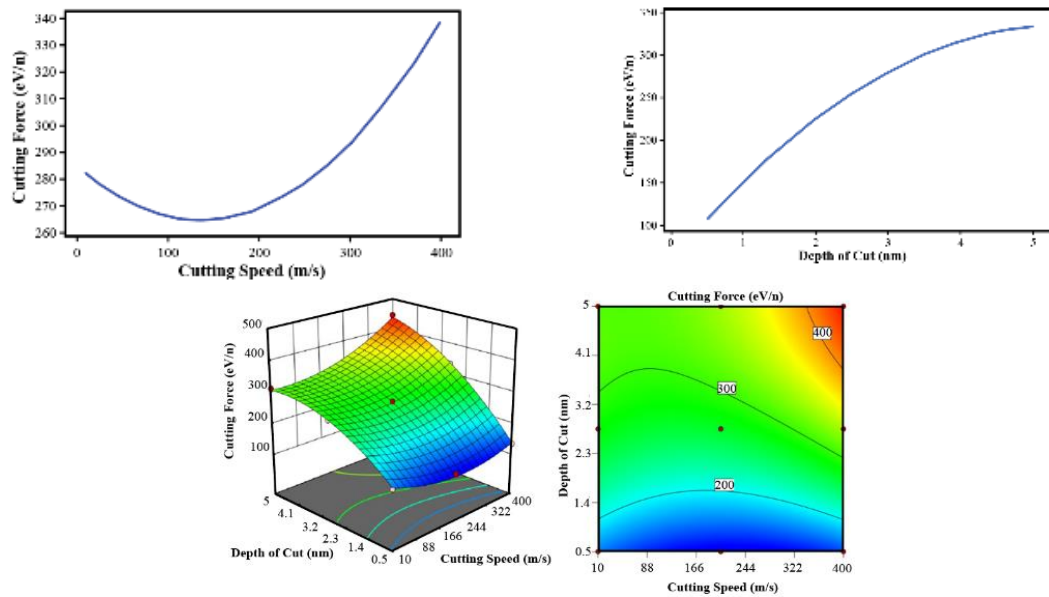


Figure 2. Variations of cutting force with cutting speed and depth of cut

##### 4.2. Thrust force response surface

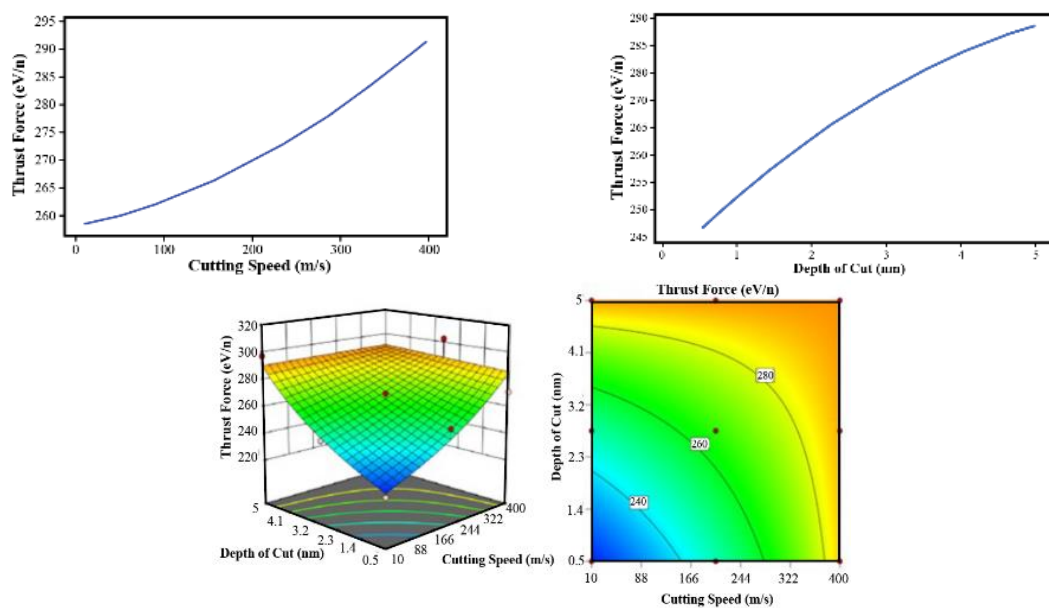


Figure 2. Variations of thrust force with cutting speed and depth of cut

##### 4.3. Hydrostatic stress response surface

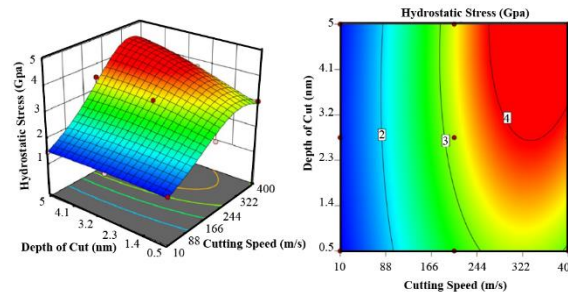


Figure 4. Variations of hydrostatic stress with cutting speed and depth of cut

#### 4.4. Von mises stress response surface

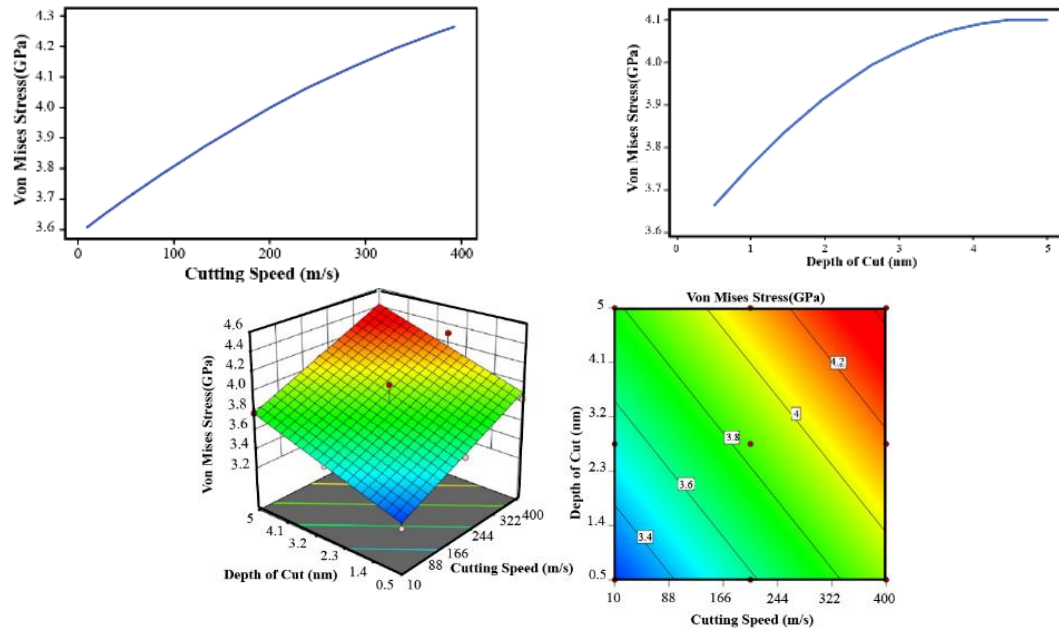


Figure 5. Variations of von mises stress with cutting speed and depth of cut

#### 4.5. Surface temperature response surface

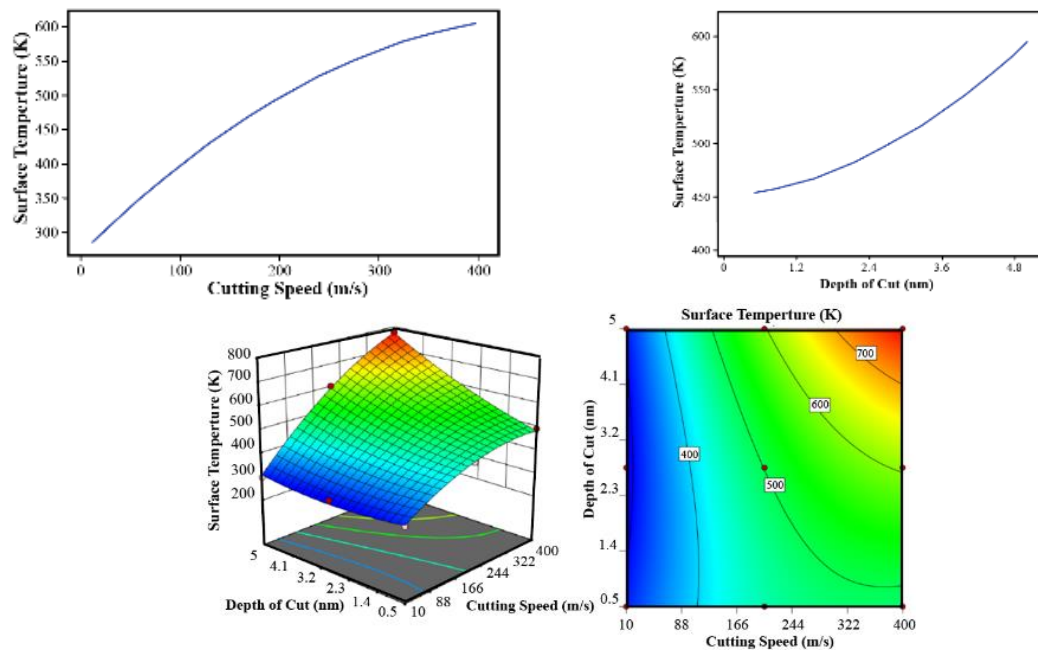


Figure 6. Variations of surface temperature with cutting speed and depth of cut

#### 4.6. Optimization

In the simulations performed in this study, the most optimal conditions were found to occur when the cutting speed is set at 10 m/s and the depth of cut is 0.5 nm. Given that hydrostatic stress depends on cutting speed and depth of cut, this optimal configuration also results in a minimum value for hydrostatic stress.

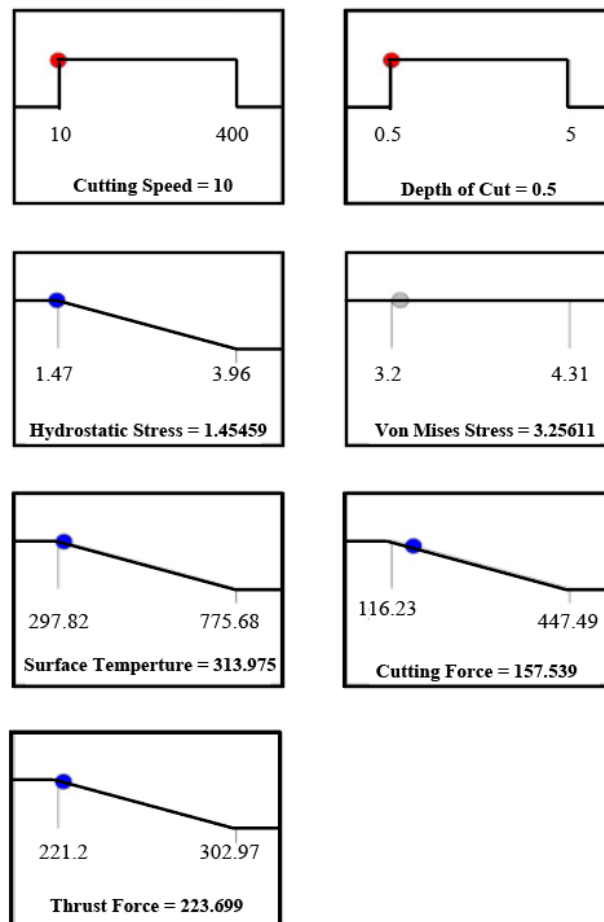


Figure 7. Diagrams for optimizing the nano-machining process of nickel-iron-chromium base alloys

#### 5. Conclusion

This study aimed to examine the effects of cutting speed and depth of cut in the nanomachining of a multicrystalline nickel-iron-chromium alloy, using molecular dynamics simulations. The results indicate that the machining cutting force increased from 152.42 to 447.49 (ev/A) as the depth of cut and cutting speed were increased. The machining thrust force increases from 221.20 to 289 (ev/A) as the depth of cut and cutting speed rise, with a more significant and steep increase at higher speeds. The von Mises stress value increased as the depth of cut and cutting speed rose, reaching levels from 3.2 to 4.3 GPa.



## بررسی تاثیر سرعت برش و عمق براده برداری بر نانوماشین کاری آلیاژ نیکل-آهن - کروم با روش سطح پاسخ به کمک دینامیک مولکولی

مجتبی ذوالفقاری<sup>الف\*</sup>، حامد حیدری<sup>ب</sup>، محمدجواد قاسمی<sup>ج</sup>، وحید طهماسبی<sup>د</sup>

<sup>الف</sup> دانشجوی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [m-zolfaghari@araku.ac.ir](mailto:m-zolfaghari@araku.ac.ir)

<sup>ب</sup> دانشجوی دکترا، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران، [hamedheydari9922@gmail.com](mailto:hamedheydari9922@gmail.com)

<sup>ج</sup> کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران، [javadghasemimohammad@gmail.com](mailto:javadghasemimohammad@gmail.com)

<sup>د</sup> استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران، [tahmasbi@araku.ac.ir](mailto:tahmasbi@araku.ac.ir)

| واژگان کلیدی                                                                 | چکیده                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| نانوماشین کاری،<br>آلیاژ چند کریستالی،<br>دینامیک مولکولی،<br>نیکل-آهن-کروم، | ماشین کاری فوق دقیق به فرآیند ساخت قطعات با دقت بسیار بالا اشاره دارد که در صنایعی مانند هوافضا، پزشکی، اپتیک و الکترونیک که در آن‌ها تolerانس‌های نانومتری، پوشش‌های سطحی ظریف و هندسه‌های دقیق ضروری است، مورد نیاز است. در این پژوهش فرآیند نانوماشین کاری آلیاژ نیکل-آهن-کروم چند کریستال با استفاده از روش دینامیک مولکولی بررسی شده است. بررسی تأثیرات پارامترهای سرعت برش و عمق براده برداری بر روی این فرآیند به روش سطح پاسخ نشان دهنده این است که با کاهش سرعت برش از ۴۰۰ تا ۱۰ متر بر ثانیه، عمق براده برداری از ۵ تا ۰/۵ نانومتر مقادیر نیروهای برشی، نیروهای عمودی و تنش ون میسز قطعه کار به ترتیب ۶۵/۹، ۲۳/۴ و ۲۵/۵۸ درصد کاهش می‌یابند. علاوه بر این زمانی که عمق براده برداری ۰/۵ نانومتر، سرعت برش ۱۰ متر بر ثانیه بود، دما به ۳۰۸/۸۲ کلوین و نیروهای ماشین کاری یعنی نیروهای برشی و نیروهای عمودی به ۱۵۲/۴۲ و ۲۲۱/۲ (eV/n) رسیده که کمینه شده و حالت بهینه‌سازی شده فرآیند ماشین کاری حاصل شده است. در نهایت، تغییرات ساختاری بررسی شده به وسیله‌ی تابع توزیع شعاعی نشانگر این است با افزایش سرعت برش از ۱۰ به ۴۰۰ متر بر ثانیه در عمق براده برداری ۲/۷۵ نانومتر، تابع توزیع شعاعی ۱۰ واحد افزایش داشته که تغییرات ساختاری قطعه کار را موجب شده است. |

### ۱- مقدمه

ماشین کاری در مقیاس نانو می‌تواند به عنوان یک فرآیند تولید فوق دقیق به روش براده برداری از مواد تعریف شود که در آن ابعاد براده برداشته شده از قطعه کار و دقت ابعادی محصول نهایی نزدیک به ۱۰۰ نانومتر یا کمتر باشد. نانوماشین کاری یک روش برای تولید قطعاتی با دقت ابعادی زیر میکرون و صافی سطح نهایی اتمی است. این فرآیند بر اثر جدایش تعداد کمی اتم از سطوح انجام می‌گردد [۱].

در زمینه‌ی ماشین کاری، چندین مدل تحلیلی اساسی برای توصیف و تحلیل جنبه‌های مختلف فرآیند ماشین کاری استفاده می‌شود. این مدل‌ها بر اساس اصول بنیادی مکانیک، علم مواد و ترمودینامیک، از جمله: مکانیک برش، مدل‌های سایش ابزار،

\* نویسنده مسئول؛ تلفن: +۹۸۸۶۳۲۶۲۵۷۰۴

آدرس پست الکترونیک: [m-zolfaghari@araku.ac.ir](mailto:m-zolfaghari@araku.ac.ir)

مدل‌های زبری سطح، مدل‌های انتقال حرارت، و مدل‌های نرخ حذف مواد ساخته شده‌اند [۲]. با گرایش به توسعه فرآیندهای فوق دقیق که می‌توانند به سطوح با کیفیت عالی در سطح نانومتر برسند، نیاز به شبیه‌سازی در این مقیاس ابعادی می‌باشد و بسیاری از مدل‌های ذکر شده برای شبیه‌سازی در این مقیاس کافی نیستند. همان‌طور که تولید مدرن به سمت راندمان بالاتر و مقرون به صرفه شدن پیش می‌رود، ماشین کاری مواد برش-سخت<sup>۱</sup> به یک چالش فزاینده تبدیل می‌شود. آلیاژهای پایه نیکل به دلیل عملکرد عالی مانند مقاومت در برابر اکسیداسیون و مقاومت در برابر دمای بالا به‌طور گسترده در زمینه‌ی هوافضا استفاده می‌شود. سطوح کلیدی اکثر قطعات مقاوم در برابر حرارت با برش دقیق یا برش فوق‌العاده دقیق به دست می‌آیند. آلیاژهای پایه نیکل متعلق به آلیاژ سری  $Ni_xFe_yCr_z$  هستند زیرا جزء اصلی آن نیکل، آهن و کروم است. با این حال، دمای بالای برش ایجاد شده در فرآیند برش باعث می‌شود که فرسودگی شیمیایی در ابزارهای برش آسان باشد. تجلی اصلی این است که سایش ابزار ناشی از تضعیف استحکام ابزار با برهمکنش بین قطعه کار و اتم‌های ابزار در سطح مشترک ابزار و براده است [۳].

هوفانگ و فنگ از ابزار پین برای شبیه‌سازی ماشین کاری در ابعاد نانو بر روی ماده مس استفاده کردند. تابع انرژی مورس برای پتانسیل بین اتم‌های قطعه کار و همچنین ابزار و قطعه کار در شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. اثرات هندسه ابزار پین و سرعت بر نیروی ماشین کاری بررسی شده و نتایج نشان می‌دهد با افزایش زاویه پین و افزایش عمق براده برداری در یک سرعت یکسان، نیروی برش افزایش می‌یابد و کار سختی ناشی از تغییر شکل پلاستیک باعث جمع شدن نابه‌جایی‌ها در جلوی ابزار شده که به دنبال آن افزایش نیروی برش را در پی دارد و همچنین مشخص شد که نیروی برش مستقل از سرعت‌های بین ۵۰ تا ۲۰۰ متر بر ثانیه در شبیه‌سازی‌ها می‌باشد [۴]. پی و همکاران به بررسی دینامیک مولکولی نانو ماشین کاری دوبعدی ماده مس با زاویه براده<sup>۲</sup> منفی پرداختند. از پتانسیل اتمی ادغام‌شده<sup>۳</sup> برای ماده مس استفاده شده و اثر سرعت برش و عمق براده برداری بر روی نیروی ماشین کاری بررسی شده است. نتایج نشان‌دهنده بزرگ شدن براده، بیشتر شدن دمای جلوی ابزار و ایجاد ناهموازی در قطعه کار در سرعت‌های بالاتر است [۵].

پی و همکاران اثر عمق برداری و سرعت برش بر روی ماده تک بلور مس به وسیله ابزار با زاویه براده ۱۲ درجه را بررسی کردند. از پتانسیل اتمی ادغام‌شده استفاده شده و ابزار صلب در نظر گرفته شده است. اثرات عمق برش، سرعت برش، جهت کریستالی و جهت برش بر تغییر شکل مواد، عیوب شبکه و نیروهای برش بررسی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که عمق برش کمتر منجر به تغییر شکل پلاستیک کمتر و نابجایی کمتر در قطعه کار می‌شود و در نتیجه سطح ماشین کاری شده صاف‌تری ایجاد می‌کند. با کاهش عمق برش، نیروی برش به سرعت افزایش می‌یابد. نتایج نشان می‌دهد که سرعت برش بالاتر منجر به عیوب شبکه بیشتر در ناحیه برش و نیروهای برش بیشتر می‌شود. همچنین مشخص شده است که جهت کریستال و جهت برش تأثیر قوی بر تغییر شکل مواد، حرکت نابجایی و نیروهای برش دارد [۶]. ژو و همکاران اثر عمق براده برداری و سرعت برش ماشین کاری سه‌بعدی مس را در دینامیک مولکولی بررسی کردند. اثرات هندسه ابزار، عمق برش، سرعت برش و دما مورد مطالعه قرار گرفته است. مشخص شده است که هندسه ابزار تأثیر قابل توجهی بر مقاومت برشی دارد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که عمق برش بیشتر منجر به تغییر شکل بیشتر مواد شده و حجم براده بزرگ‌تر می‌شود، در نتیجه منجر به نیروی برش بیشتر و نیروی عمودی بزرگ‌تر می‌شود. همچنین سرعت برش بالاتر منجر به حجم براده بیشتر در جلوی ابزار و افزایش نیروی برش و نیروی عمودی می‌شود. با افزایش دما حجم براده در جلوی ابزار افزایش می‌یابد در حالی که نیروی برش و نیروی عمودی کاهش می‌یابد [۷].

شی و همکاران نانو-ماشینکاری ساختارهای مس چندبلوری<sup>۴</sup> را با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. شش ساختار مس چندبلوری تولید شده به ترتیب دارای اندازه دانه‌های معادل ۵/۳۲، ۶/۷۰، ۸/۴۴، ۱۳/۴۰، ۱۴/۷۵ و ۱۶/۸۸ نانومتر هستند. سه سطح عمق برش و سرعت ماشین کاری نیز در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش عمق برش و سرعت ماشین کاری نیروهای برشی بیشتری مورد نیاز است. همچنین مشخص شد در محدوده اندازه دانه ۵/۳۲ تا ۱۴/۷۵ نانومتر، نیروهای برش با افزایش اندازه دانه برای مس نانو ساختار افزایش می‌یابد. برهمکنش مرزدانه - نابجایی نشان می‌دهد که

<sup>1</sup> Difficult-to-cut

<sup>2</sup> Rake angle

<sup>3</sup> Embedded atom method

<sup>4</sup> Polycrystalline

مقاومت مرزدانه در برابر حرکت نابجایی مکانیزم اساسی رابطه هال-پچ است، درحالی که انتشار و حرکت مرزدانه دلیل رابطه معکوس هال-پچ است [۸]. هائو و همکاران مکانیزم سایش ابزار کاربید سیلیکون برای برش سوپرآلیاژ پایه نیکل را با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. تابع انرژی پتانسیل مورس بین اتم های مختلف در نظر گرفته شده است. همچنین مکانیزم برهمکنش بین ابزار و ماده قطعه کار در فرآیند شبیه سازی برش مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که مکانیزم اصلی انتشار اتم های نیکل، کروم و آهن در ابزارهای برش، انتشار مرز دانه ای است [۳].

فن و همکاران مکانیزم کار سختی در برش آلیاژ پایه نیکل سری Ni-Fe-Cr را با استفاده از ابزار نیتريد بور مکعبی<sup>۱</sup> به روش تحلیل شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. تابع پتانسیل مورس و پتانسیل اتمی ادغام شده برای توصیف برهمکنش بین اتم ها استفاده شده است. سپس، تأثیر تغییر نیروی برش، چگالی نابجایی، انباشته شدن نابجایی و نابجایی لومر- کوترل بر کار سختی بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که مکانیزم کار سختی در آلیاژ Ni-Fe-Cr انباشته شدن<sup>۲</sup> نابجایی نیست بلکه وجود نابجایی های غیر متحرک لومر- کوترل<sup>۳</sup> نیز می باشد. عناصر محلول که انرژی نقص در چینش را کاهش می دهند به طور غیرمستقیم بر تولید نابجایی های لومر- کوترل تأثیر می گذارند. علاوه بر این، اتم های محلول موجود در آلیاژ پایه نیکل می توانند نابجایی ها را به هم متصل<sup>۴</sup> کنند و نابجایی جدیدی ایجاد کرده که مانع از حرکت نابجایی ها شوند [۹]. هائو و همکاران عملکرد ابزار هنگام برش یک مدل سوپرآلیاژ پایه نیکل ساده شده را با استفاده از روش دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج نشان می دهد که عملکرد مقاومت<sup>۵</sup> در برابر سایش ابزار در حین برش با سرعت بالا بهبود یافته است [۱۰].

هائو و همکاران با بررسی اتمی تأثیر نانو ماشین کاری آلیاژ نیکل بر تکامل نقص های زیرسطحی به این نتیجه دست یافتند که افزایش سرعت برش می تواند عیوب زیرسطحی را کاهش دهد و کیفیت قطعات ماشین کاری شده را بهبود بخشد، درحالی که عمق برش بیشتر منجر به نقص در چینش بیشتر در ناحیه زیرسطحی می شود [۱۱]. در پژوهشی دیگر با روش دینامیک مولکولی نانو برش آلیاژ تک کریستالی پایه نیکل را با ابزار سرامیکی نیتريد سیلیکون بررسی کرده و نشان دادند که افزایش سرعت برش منجر به تنش هیدرواستاتیک، انرژی کریستالی و دمای برش بالاتر می شود و در نتیجه تغییرات ساختار شبکه ای شدیدتر و نرخ تبدیل ساختار کریستالی افزایش می یابد [۱۲]. دوان و همکاران با بررسی نانو ماشین کاری آلیاژ NiFeCo به روش دینامیک مولکولی نشان دادند که سرعت، عمق براده برداری و شعاع ابزار بالاتر ماشین کاری منجر به افزایش نیرو، حجم براده و دما شده است [۱۳]. نانو ماشین کاری سوپرآلیاژهای پایه نیکل برای بهبود خواص مکانیکی آنها، بهینه سازی ریزساختار، دستیابی به دقت بالا و پرداخت سطح، و امکان سازگاری با تکنیک های پیشرفته ساخت بسیار مهم است. این مزایا به توسعه اجزای با کارایی بالا برای صنایعی مانند هوافضا، انرژی و خودرو کمک می کند، جایی که قابلیت اطمینان و کارایی در درجه اول اهمیت است [۱۴]. در این تحقیق شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانو ماشین کاری برای آلیاژ Ni<sub>18</sub>Fe<sub>8</sub>Cr انجام شده است. پس از استخراج نتایج از روش دینامیک مولکولی به تحلیل، بررسی و یافتن یک معادله رگرسیون مناسب برای بررسی اثرات پارامترهای سرعت برش و عمق براده برداری بر پارامترهای نیرو، دما و تنش فرآیند نانو ماشین کاری به روش سطح پاسخ پرداخته شده و سپس بهینه سازی چندهدفه<sup>۶</sup> فرآیند نانو ماشین کاری با هدف کمینه سازی نیروهای ماشین کاری و دما به روش تپه نوردی<sup>۷</sup> انجام شده است. به طور کلی، این تحقیق به درک فرآیند نانو ماشین کاری آلیاژ Ni<sub>18</sub>Fe<sub>8</sub>Cr کمک می کند و نکاتی را در مورد بهینه سازی پارامترها و بهبودهای حاصل در دقت ابعادی و تغییرات ساختاری ارائه می دهد. این یافته ها کاربردهای بالقوه ای در تولید قطعات دفاعی، هوافضا دارند، جایی که ماشین کاری فوق دقیق در محدوده نانومتری مورد نیاز است.

<sup>1</sup> Cubic Boron Nitride

<sup>2</sup> Pile up

<sup>3</sup> Lomer cottrell dislocation

<sup>4</sup> Joint

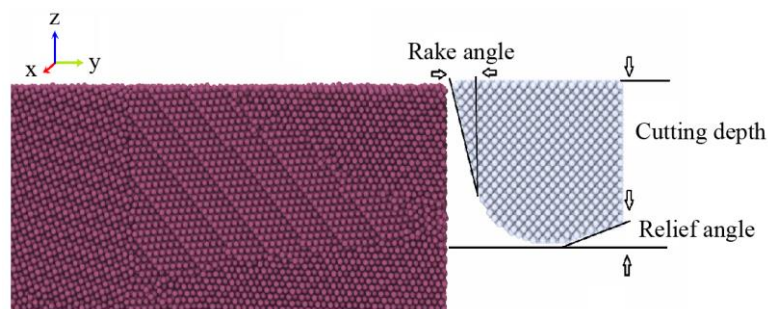
<sup>5</sup> Resistance performance

<sup>6</sup> Multi objective

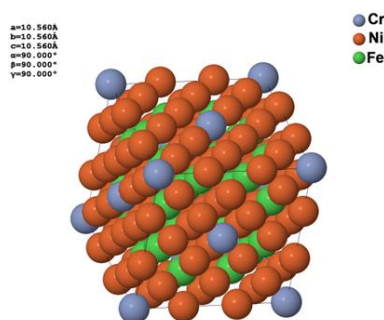
<sup>7</sup> Hill climbing

## ۲- شبیه سازی دینامیک مولکولی

نمایی از پارامترها، هندسه ابزار و قطعه کار در فرایند نانوماشین کاری در شکل ۱ نشان داده شده است. مدل سازی هندسی در این پژوهش شامل دو بخش در نرم افزار لمپس می باشد. بخش اول قطعه کار آلیاژ بر پایه نیکل چند بلوری از جنس نیکل-آهن-کروم با ساختار مکعبی  $FCC^1$  و ثابت شبکه  $10/3596$  آنگستروم، شکل ۲ و بخش دوم ابزار برش الماس در ساختار الماس مکعبی با ثابت شبکه  $3/567$  آنگستروم می باشد. ابزار تیغه به گونه ای مدل شده است که زوایای آزاد<sup>۲</sup> و براده و شعاع نوک ابزار در آن لحاظ شده است. همچنین ابزار برش به صورت ماده تک کریستال مدل شده و سایر اطلاعات هندسی مدل های ایجاد شده در این پژوهش در جدول ۱ و ۲ مشخص شده است.



شکل ۱ نمایی از مؤلفه های ماشین کاری



شکل ۲ ساختار اتمی نیکل-آهن-کروم [۱۵]

جدول ۱ خصوصیات هندسی قطعه کار

| value | Parameter (unit)          |
|-------|---------------------------|
| ۳۵۰   | Length ( $\text{\AA}^0$ ) |
| ۸۰    | Width ( $\text{\AA}^0$ )  |
| ۸۰    | Height ( $\text{\AA}^0$ ) |

در این پژوهش تابع پتانسیل اتمی ادغام شده برای برهم کنش اتم های داخل قطعه کار آهن-آهن، کروم-کروم، نیکل-نیکل، نیکل-آهن، آهن-نیکل و نیکل-کروم به کار می رود [۱۳]. پتانسیل مورس یک تابع پتانسیل انرژی است که برای مدل سازی کشش بین اتمی در مولکول ها استفاده می شود. پتانسیل مورس می تواند به طور دقیق رفتار پیوندهای کووالانسی را مدل کند، به ویژه برای مولکول های کوچک. فرمول پتانسیل مورس به صورت رابطه ۱ بیان می شود [۱۶].

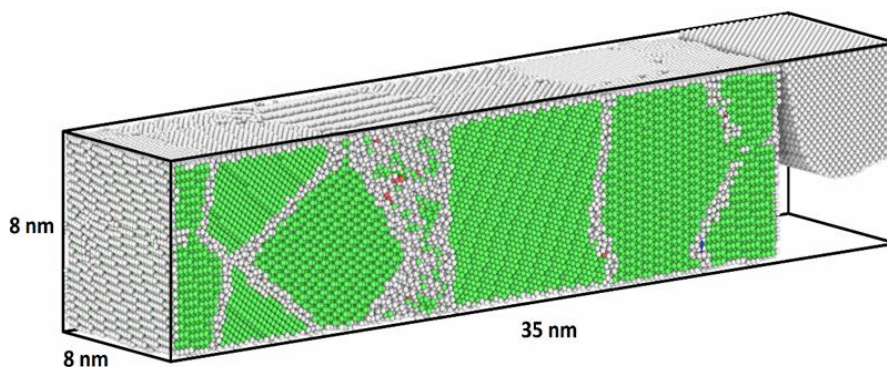
<sup>1</sup> Face-centered cubic

<sup>2</sup> Relief angle

جدول ۲ خصوصیات هندسی و موقعیت ابزار

| value | Parameter (unit)                                                                          |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------|
| ۱۰    | Tool tip radius ( $A^0$ )                                                                 |
| ۱۳    | Relief angle( $^0$ )                                                                      |
| -۱۹   | Rake angle( $^0$ )                                                                        |
| ۳     | The distance between the distance between the tip of the tool and the workpiece ( $A^0$ ) |

مدل ایجاد شده در محیط نرم افزار لمپس، شکل ۳، که نشان می دهد راستای برش یا حرکت ابزار در راستای [۰ ۱ ۰] و صفحه برش قطعه کار صفحه (۰ ۰ ۱) است.



شکل ۳ نمای مدل ایجاد شده قطعه کار و ابزار برش در محیط نرم افزار اویتو<sup>۱</sup>

در این پژوهش تابع پتانسیل اتمی ادغام شده<sup>۲</sup> برای برهم کنش اتم های داخل قطعه کار آهن-آهن، کروم-کروم، نیکل-نیکل، نیکل-آهن، آهن-نیکل و نیکل-کروم به کار می رود [۱۳]. پتانسیل مورس<sup>۳</sup> یک تابع پتانسیل انرژی است که برای مدل سازی کشش بین اتمی در مولکول ها استفاده می شود. پتانسیل مورس می تواند به طور دقیق رفتار پیوندهای کووالانسی را مدل کند، به ویژه برای مولکول های کوچک. فرمول پتانسیل مورس به صورت رابطه ۱ بیان می شود [۱۶].

$$E(r) = D_e * \left[ 1 - e^{-\alpha * (r - r_e)} \right]^2 - D_e \quad (1)$$

در رابطه ۱  $E(r)$  انرژی پتانسیل در فاصله  $r$  بین دو اتم و  $D_e$  عمق چاه پتانسیل است، که معادل انرژی پتانسیل در فاصله تعادلی  $r_e$  است.  $\alpha$  پارامتری است که شکل پتانسیل را تعیین می کند.  $r_e$  فاصله تعادلی بین دو اتم است.

از تابع پتانسیل مورس برای جفت اتم های بین ابزار و قطعه کار از قبیل آهن-کربن، کروم و کربن-نیکل استفاده شده است [۳]. از برهم کنش بین اتم های کربن موجود در داخل ساختار ابزار صرف نظر گردیده و صلب در نظر گرفته شده است. بدین ترتیب ضرایب تابع پتانسیل مورس در جدول ۳ جهت استفاده در شبیه سازی در نظر گرفته شده است.

جدول ۳ ضرایب پتانسیل مورس بین ابزار و قطعه کار [۳]

| <i>C-Cr</i> | <i>C-Ni</i> | <i>C-Fe</i> | Coefficients of the potential function(unit) |
|-------------|-------------|-------------|----------------------------------------------|
| ۲/۶۴۹۲۹۹    | ۱/۹۷۱۷۵     | ۱/۰۰۵۶۶۴    | $D \text{ (eV)}$                             |
| ۲/۶۱۹۹۴     | ۱/۹۸۷۴۵     | ۱/۰۰۳۹۲     | $(1/A)\alpha$                                |
| ۲/۶۱۷۵۸۹    | ۲/۰۶۳۵۵     | ۱/۰۳۴۱۷۲    | $r_0 \text{ (Å)}$                            |

اتم هایی که قطعه کار از آن ها تشکیل شده در سه گروه طبقه بندی می شوند: اتم های مرزی، اتم های دما ثابت<sup>۴</sup> و اتم های نیوتونی. شکل ۴ نشانگر نحوه اعمال این شرایط مرزی به قطعه کار می باشد. هنگرد استفاده شده NVE و با گام زمانی یک فمتو

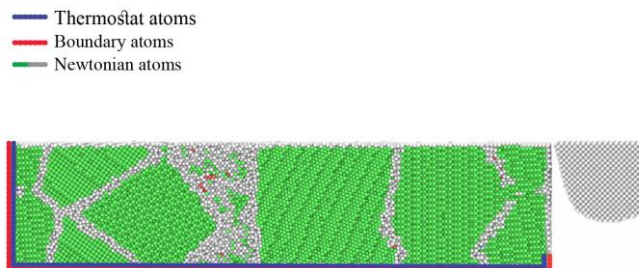
<sup>۱</sup> Ovito

<sup>۲</sup> Embedded-Atom Method

<sup>۳</sup> Morse potential

<sup>۴</sup> Thermostat atoms

ثانیه در ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی است.



شکل ۴ نمایش از مدل شبیه سازی به همراه شرایط مرزی

### ۳- طراحی آزمایش

ساختار آلیاژ نیکل-آهن-کروم علاوه بر مزیت هایی که دارد، خصوصیتی دارد که باعث به وجود آمدن مشکلاتی در ماشین کاری می شود، یکی از آن ویژگی ها هدایت حرارتی کم و کار سختی بالا می باشد که باعث سایش جدی ابزار در فرآیند ماشین کاری می شود [۱۷]. از این رو بررسی سرعت برش و عمق براده برداری و بررسی هم زمان این دو پارامتر در ماشین کاری یک مسئله مهم در آلیاژ می تواند در نظر گرفته شود. به منظور انجام روش سطح پاسخ احتیاج به انجام طراحی آزمایش برای برازش داده ها می باشد. عامل های ورودی سرعت برش و عمق براده برداری است، جدول ۴ و نیروی ماشین کاری، تنش هیدرواستاتیک، تنش ون میسر و دما پاسخ ها می باشند. طراحی آزمایش با استفاده از نرم افزار دیزاین اکسپرت<sup>۱</sup> به روش مرکب مرکزی انجام گرفته و تعداد عامل های متغیر ورودی در آزمایش دو عدد است.

جدول ۴ طراحی آزمایش سطح پاسخ

| Cutting depth (nm) | Cutting speed (m/s) | No. |
|--------------------|---------------------|-----|
| ۵                  | ۴۰۰                 | ۱   |
| ۵                  | ۲۰۵                 | ۲   |
| ۰/۵                | ۴۰۰                 | ۳   |
| ۵                  | ۱۰                  | ۴   |
| ۰/۵                | ۱۰                  | ۵   |
| ۲/۷۵               | ۲۰۵                 | ۶   |
| ۲/۷۵               | ۴۰۰                 | ۷   |
| ۲/۷۵               | ۱۰                  | ۸   |
| ۰/۵                | ۲۰۵                 | ۹   |

### ۴- نتایج شبیه سازی و بحث

#### ۴-۱- صحت سنجی

صحت فرآیند شبیه سازی، با مقایسه نتایج حاصل از این پژوهش با نتایج تحقیقی دیگر انجام گرفته است. با مشاهده جدول ۵، در سرعت برش ۴۰۰ (m/s) و عمق براده بردار (nm) ۵ می توان دریافت که نیروی برشی و عمودی در شبیه سازی حاضر (ev/A) ۴۴۷/۴۹ و (ev/A) ۲۸۹، در حالی که در شبیه سازی ماده چندبلوری مس با ساختار FCC [۸] در همین پارامترهای ورودی نیروی برشی و عمودی (ev/A) ۴۵۸/۳۶۵ و (ev/A) ۲۹۴/۶۹۵ است، بنابراین می توان دریافت که نیروی برش و عمودی در شبیه سازی انجام شده انطباق مناسبی با نتایج مقاله مورد نظر دارد. همچنین در پارامترهای ورودی یعنی سرعت ۲۰۵ m/s و عمق براده بردار ۲/۷۵ دما به مقدار K ۴۹۴/۷۵ رسیده که با مقدار K ۵۴۱/۳۵ حاصل از نتایج پژوهشی که نانوماشین کاری آلیاژ NiFeCo چندبلوری را بررسی کرده [۱۳]، مطابقت خوبی دارد زیرا ۹/۴ درصد اختلاف دارند. بر اساس تمامی نتایج مشاهده شده در این قسمت می توان پی برد که روند شبیه سازی، صحیح می باشد و نتایج حاصل آن قابل استناد است.

<sup>۱</sup> Design-Expert

## ۴-۲- سطح پاسخ

روش سطح پاسخ، که به وسیله نرم افزار دیزاین اکسپرت پیاده سازی شده، به منظور تقریب رفتار نانوماشین کاری بر اساس مؤلفه های ورودی سرعت برش و عمق براده برداری انجام شده است، جدول ۵. خروجی های شبیه سازی فرآیند نانوماشین کاری نیروی برش، نیروی عمودی، تنش هیدرواستاتیک، تنش ون میسر در قطعه کار و میانگین دمای ناحیه ی برش می باشند.

جدول ۵ نتایج حاصل از شبیه سازی

| No. | Cutting speed (m/s) | Cutting depth (nm) | Cutting force (eV/n) | Thrust force (eV/n) | Hydrostatic stress (GPa) | Von Mises stress (GPa) | Surface temperature (°K) |
|-----|---------------------|--------------------|----------------------|---------------------|--------------------------|------------------------|--------------------------|
| ۱   | ۴۰۰                 | ۵                  | ۴۴۷/۴۹               | ۲۸۹                 | ۳/۹۶                     | ۴/۳۱                   | ۷۷۵/۶۸                   |
| ۲   | ۴۰۰                 | ۲/۷۵               | ۳۳۵/۴۶               | ۳۰۲/۹۷              | ۳/۷۷                     | ۴/۳۰                   | ۵۹۵/۰۳                   |
| ۳   | ۴۰۰                 | ۰/۵                | ۱۳۴/۸۰               | ۲۷۱/۶۹              | ۳/۰۴                     | ۳/۸۴                   | ۴۹۳/۰۳                   |
| ۴   | ۲۰۵                 | ۰/۵                | ۱۱۶/۲۳               | ۲۵۵/۰۲              | ۲/۴۵                     | ۳/۵۵                   | ۴۵۱/۷۴                   |
| ۵   | ۱۰                  | ۵                  | ۳۱۳/۸۴               | ۲۹۷/۳۴              | ۱/۴۷                     | ۳/۷۸                   | ۲۹۷/۸۲                   |
| ۶   | ۲۰۵                 | ۵                  | ۳۲۱/۹۹               | ۲۷۴/۹۴              | ۳/۵۲                     | ۴/۰۸                   | ۶۰۵/۷۰                   |
| ۷   | ۱۰                  | ۲/۷۵               | ۲۸۱/۷۲               | ۲۴۶/۵۱              | ۱/۴۷                     | ۳/۵۱                   | ۳۰۳/۴۷                   |
| ۸   | ۱۰                  | ۰/۵                | ۱۵۲/۴۲               | ۲۲۱/۲۰              | ۱/۵۱                     | ۳/۲                    | ۳۰۸/۸۲                   |
| ۹   | ۲۰۵                 | ۲/۷۵               | ۲۷۲/۸۵               | ۲۶۹/۸۸              | ۳/۲۸                     | ۴/۰۳                   | ۴۹۴/۷۵                   |

با توجه به نتایج حاصل شده، جدول ۵، معادلات رگرسیون مناسب و ضرایب آن جهت تعیین نحوه رفتار خروجی های این فرآیند و تغییرات آن در بخش پنج محاسبه شده است. برای تخمین ضرایب تقریبی مدل های چند جمله ای از روش حداقل مربعات استفاده شده است [۱۸].

## ۴-۳- سطح پاسخ نیروی برش

نیروی برش حاصل از فرآیند نانوماشین کاری مجموع نیروهای برهم کنش بین اتم های قطعه کار و ابزار برش در راستای حرکت ابزار است، که حاصل گرادیان سطح انرژی بین اتمی است، می باشد. معادله رگرسیون نیروی برشی رابطه ۲ است:

$$F_c = \beta_0 + \beta_1 V + \beta_2 D + \beta_{12} VD + \beta_{11} V^2 + \beta_{22} D^2 \quad (2)$$

D عمق براده برداری، V سرعت برش و  $F_c$  نیروی برشی است، پس از معرفی مدل رگرسیون نیروی برشی، آنالیز واریانس عوامل ورودی بر طبق جدول ۵ انجام شده است و نتایج در جدول ۶ بیان شده است.

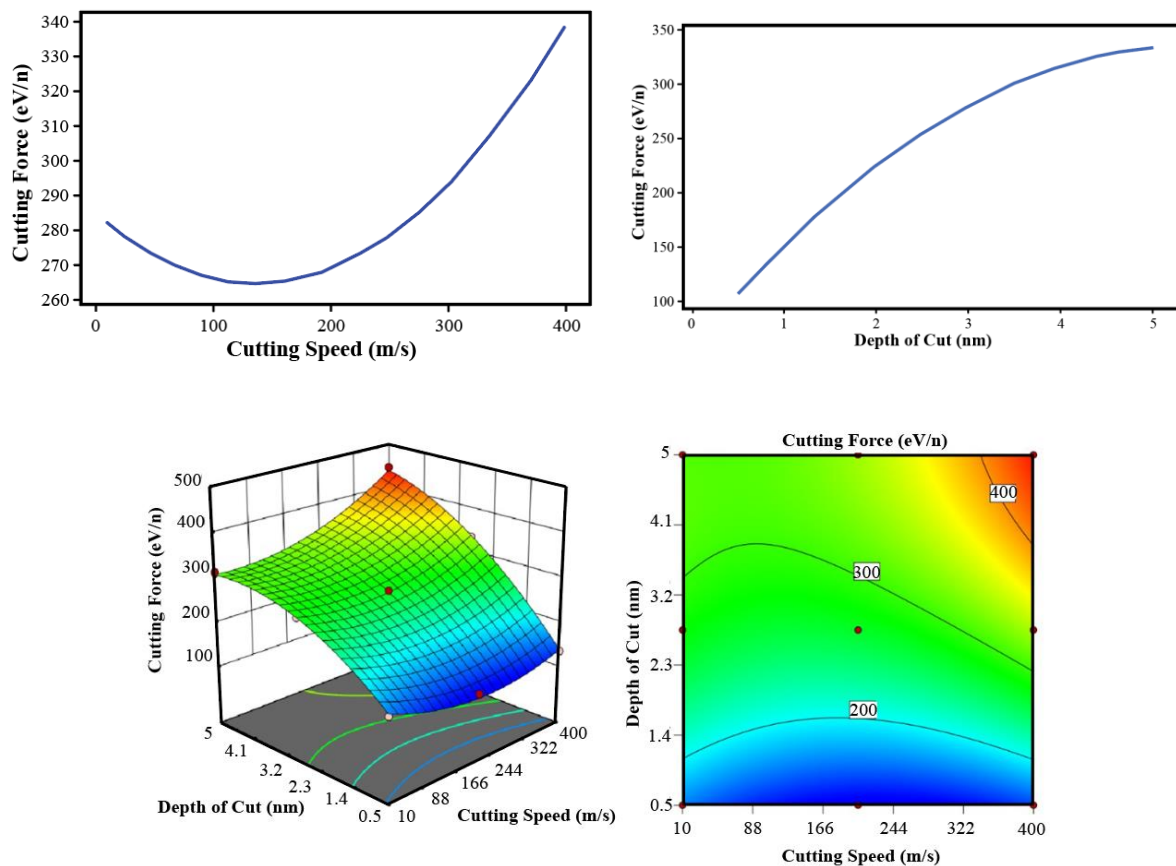
جدول ۶ آنالیز واریانس سطح پاسخ نیروی برشی

| Parameter         | DF | Adj SS  | Adj MS  | F-Value | P-Value |
|-------------------|----|---------|---------|---------|---------|
| Model             | ۵  | ۹۵۶۳۶/۸ | ۱۹۱۲۷/۴ | ۱۶۱/۱۲  | ۰/۰۰۱   |
| Linear            | ۲  | ۸۱۸۴۰/۸ | ۴۰۹۲۰/۴ | ۳۴۴/۶۹  | ۰/۰۰۰   |
| V                 | ۱  | ۴۸۰۳/۶  | ۴۸۰۳/۶  | ۴۰/۴۶   | ۰/۰۰۸   |
| D                 | ۱  | ۷۷۰۳۷/۲ | ۷۷۰۳۷/۲ | ۴۶۸/۹۱  | ۰/۰۰۰   |
| Square            | ۲  | ۸۰۷۵/۳  | ۴۰۳۷/۶  | ۳۴/۰۱   | ۰/۰۰۹   |
| V <sup>2</sup>    | ۱  | ۳۲۹۶/۴  | ۳۲۹۶/۴  | ۲۷/۷۷   | ۰/۰۱۳   |
| D <sup>2</sup>    | ۱  | ۴۷۷۸/۸  | ۴۷۷۸/۸  | ۴۰/۲۵   | ۰/۰۰۸   |
| 2-Way Interaction | ۱  | ۵۷۲۰/۷  | ۵۷۲۰/۷  | ۴۸/۱۹   | ۰/۰۰۶   |
| VD                | ۱  | ۵۷۲۰/۷  | ۵۷۲۰/۷  | ۴۸/۱۹   | ۰/۰۰۶   |
| Error             | ۳  | ۳۵۶/۲   | ۱۱۸/۷   |         |         |
| Total             | ۸  | ۹۵۹۹۲/۹ |         |         |         |

معادله‌ی انتخابی مرتبه دوم و مقدار  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  این مدل به ترتیب ۰/۹۹۶۳، ۰/۹۹۰۱ و ۰/۹۵۵۹ می‌باشد. با توجه به جدول ۶ می‌توان این را دریافت که عواملی که مقدار P-value آن‌ها از ۰/۰۵ کمتر بوده، مؤثر هستند. اثر مؤلفه عمق براده برداری بر نیروی برش بیشتر می‌باشد. پس از به دست آوردن ضرایب معادله و آنالیز واریانس، رابطه ۳، معادله سطح پاسخ نیروی برشی خواهد بود:

$$F_c = 121.81304 - 0.529677 \times V + 85.79703 \times D + 0.086194 \times V \times D + 0.001068 \times V^2 - 9.65564 \times D^2 \quad (3)$$

همان‌طور که در شکل ۵ قابل مشاهده است با افزایش عمق براده برداری نیروی برش افزایش می‌یابد زیرا تعداد پیوندهای بیشتری باید شکسته شود تا براده جدا شود، همچنین در سرعت‌های پایین تغییرات نیرو قابل مشاهده نمی‌باشد ولی در سرعت‌های بالا به دلیل این که نرخ کرنش افزایش می‌یابد یعنی مواد بیشتری در واحد زمان حذف می‌شود، استحکام ماده افزایش می‌یابد که باعث افزایش نیروی برش می‌شود [۱۹ و ۲۰].



شکل ۵ تغییرات نیروی برشی بر اساس سرعت و عمق براده برداری

#### ۴-۴- سطح پاسخ نیروی عمودی

نیروی عمودی ( $F_T$ ) ناشی از فرآیند نانوماشین کاری مجموع برآیند نیروهای برهم‌کنش بین اتم‌های قطعه کار و ابزار در راستای عمود بر سطح ماشین کاری می‌باشد. رابطه‌ی ۴، معادله رگرسیون نیروی عمودی ناشی از ماشین کاری است.

$$F_T = \beta_0 + \beta_1 V + \beta_2 D + \beta_{12} VD \quad (4)$$

پس از معرفی مدل رگرسیون نیروی عمودی، آنالیز واریانس عوامل ورودی بر طبق جدول ۷ انجام شده است.

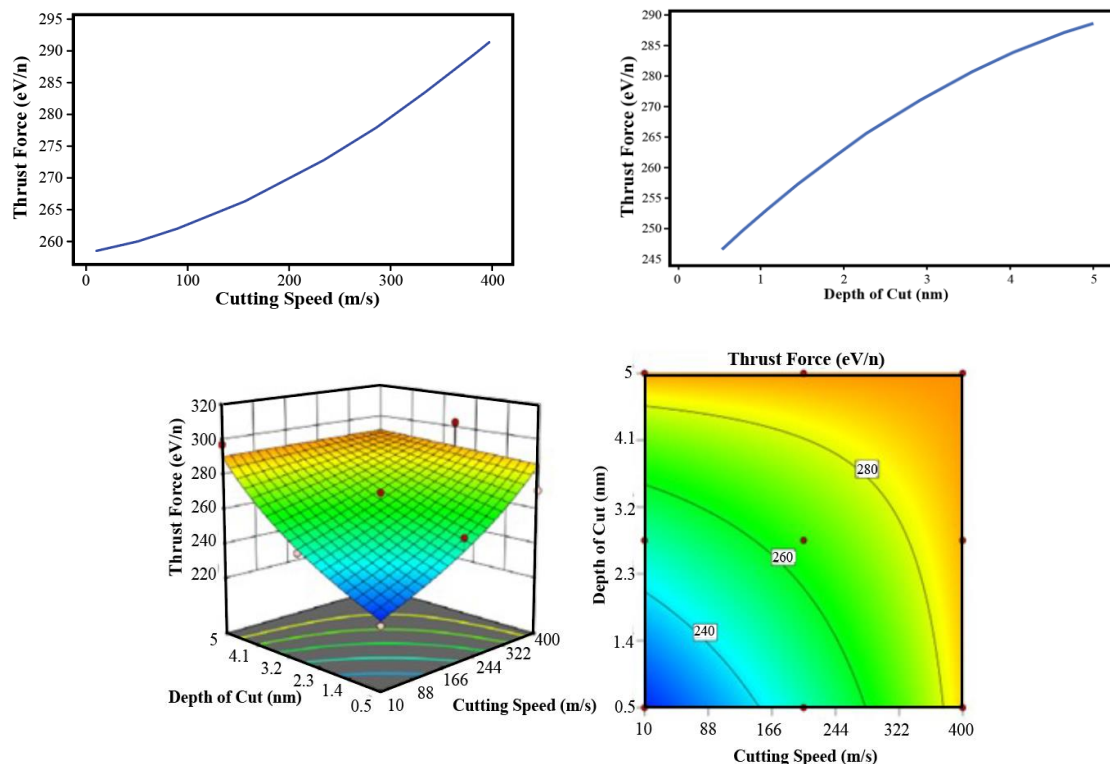
جدول ۷ آنالیز واریانس سطح پاسخ نیروی عمودی

| P-Value | F-Value | Adj MS  | Adj SS  | DF | Parameter             |
|---------|---------|---------|---------|----|-----------------------|
| ۰/۱۲۹   | ۴/۳۱    | ۹۴۴/۶۶  | ۴۷۲۳/۲۹ | ۵  | Model                 |
| ۰/۰۵۷   | ۸/۵۹    | ۱۸۸۱/۳۹ | ۳۷۶۲/۷۸ | ۲  | Linear                |
| ۰/۰۷۳   | ۷/۴۰    | ۱۶۲۰/۶۶ | ۱۶۲۰/۶۶ | ۱  | <i>V</i>              |
| ۰/۰۴۹   | ۹/۷۸    | ۲۱۴۲/۱۳ | ۲۱۴۲/۱۳ | ۱  | <i>D</i>              |
| ۰/۸۱۶   | ۰/۲۲    | ۴۷/۶۳   | ۹۵/۲۶   | ۲  | Square                |
| ۰/۶۷۵   | ۰/۲۱    | ۴۶/۸۲   | ۴۶/۸۲   | ۱  | <i>V</i> <sup>۲</sup> |
| ۰/۶۷۰   | ۰/۲۲    | ۴۸/۴۵   | ۴۸/۴۵   | ۱  | <i>D</i> <sup>۲</sup> |
| ۰/۱۴۱   | ۳/۹۵    | ۸۶۵/۲۴  | ۸۶۵/۲۴  | ۱  | 2-Way Interaction     |
| ۰/۱۴۱   | ۳/۹۵    | ۸۶۵/۲۴  | ۸۶۵/۲۴  | ۱  | <i>VD</i>             |
|         |         | ۲۱۸/۹۶  | ۶۵۶/۸۷  | ۳  | Error                 |
|         |         |         | ۵۳۸۰/۱۶ | ۸  | Total                 |

مقدار  $R^2$ ،  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  این مدل به ترتیب ۰/۸۷۷۹، ۰/۶۷۴۴ و صفر می‌باشد. اثر مؤلفه عمق براده برداری بر نیروی عمودی بیشتر می‌باشد. بنابراین پس از به دست آوردن ضرایب معادله، رابطه ۴، معادله سطح پاسخ نیروی عمودی به شکل رابطه ۵ خواهد بود:

$$F_T = 208.6 + 0.124 \times V + 20.6 \times D - 0.0335 \times V \times D + 0.000127 \times V^2 - 0.97 \times D^2 \quad (۵)$$

همان‌طور که در شکل ۶ قابل مشاهده است با افزایش سرعت برش و عمق براده برداری نیروی عمودی افزایش می‌یابد زیرا در سرعت‌های برش بالاتر و عمق براده برداری بیشتر، ضخامت براده تمایل به افزایش دارد و این افزایش ضخامت براده منجر به افزایش نیروی نرمال بیشتر برای بیرون راندن براده از ناحیه برش می‌شود [۲۰].



شکل ۶ تغییرات نیروی عمودی بر اساس سرعت و عمق براده برداری

#### ۴-۵- سطح پاسخ تنش هیدرواستاتیک

تنش هیدرواستاتیک در دینامیک مولکولی برای ساختار با حجم مشخص به وسیله ی رابطه ی ۶ حاصل می شود [۲۱]:

$$S_{hydro} = \frac{\sum_1^N (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})}{3V_{sub}} \quad (۶)$$

در رابطه ی ۷،  $V_{sub}$  حجم زیر ساختار مورد بررسی و  $N$  تعداد اتم های موجود می باشد. معادله رگرسیون تنش هیدرواستاتیک بر اساس مؤلفه های سرعت برش و عمق براده برداری، رابطه ۷، به دست آمده است.

$$1/S_{hydro} = \beta_0 + \beta_1 D + \beta_2 V + \beta_{12} DV + \beta_{11} D^2 + \beta_{22} V^2 \quad (۷)$$

در رابطه (۷) سرعت برش  $V$  و عمق براده برداری می باشد و  $S_{hydro}$  تنش هیدرواستاتیک است. پس از معرفی مدل رگرسیون تنش هیدرواستاتیک، آنالیز واریانس عوامل ورودی بر طبق جدول ۸ انجام شده است.

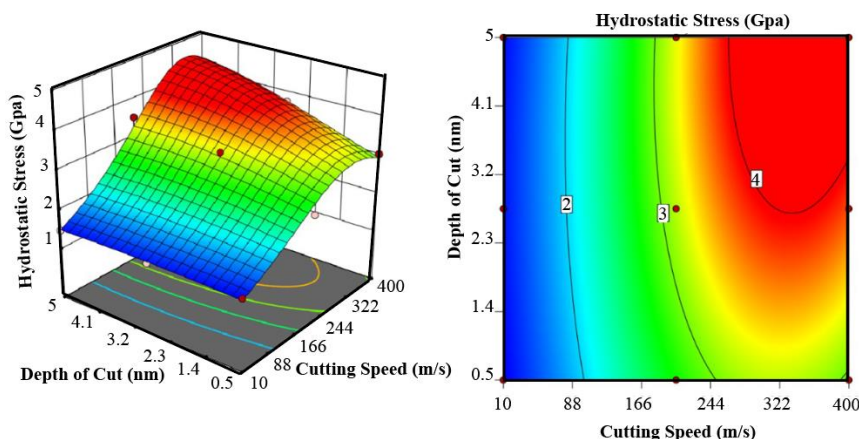
جدول ۸ آنالیز واریانس نتایج تنش هیدرواستاتیک

| P-value | F-value | Average of squares | sum of squares | Parameter |
|---------|---------|--------------------|----------------|-----------|
| ۰/۱۳۰۱  | ۴/۲۹    | ۰/۰۰۵۵             | ۰/۰۰۵۵         | $D$       |
| ۰/۰۰۰۹  | ۱۷۸/۱۹  | ۰/۲۳۰۵             | ۰/۲۳۰۵         | $V$       |
| ۰/۲۸۰۶  | ۱/۷۲    | ۰/۰۰۲۲             | ۰/۰۰۲۲         | $VD$      |
| ۰/۵۰۴۳  | ۰/۵۷۲۹  | ۰/۰۰۰۷             | ۰/۰۰۰۷         | $D^2$     |
| ۰/۰۱۰۵  | ۳۲/۹۰   | ۰/۰۴۲۶             | ۰/۰۴۲۶         | $V^2$     |

معادله ی انتخابی مرتبه دوم و مقدار  $R^2$ ،  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  به ترتیب برابر با ۰/۹۸۶۴، ۰/۹۶۳۷ و ۰/۸۴۲۳ می باشد. از آنجاکه اختلاف بین  $R_{pre}^2$  و  $R_{adj}^2$  تقریباً کمتر از ۰/۲ می باشد، مدل ارائه شده مناسب است. مؤلفه های کم اثر مؤلفه های  $D$ ،  $DV$  و  $D^2$  می باشند که می توان اثر این مؤلفه ها را در نظر نگرفت. اثر مؤلفه سرعت بر تنش هیدرواستاتیک بیشتر می باشد. در نهایت مدل سطح پاسخ تنش هیدرواستاتیک و ضرایب معادله آن به شکل رابطه ۸ محاسبه شده است.

$$\frac{1}{S_{hydro}} = 0.722411 - 0.002430 \times V - 0.023389 \times D - 0.000054 \times V \times D + 3.83632 \times 10^{-6} \times V^2 + 0.003801 \times D^2 \quad (۸)$$

پس از به دست آوردن ضرایب معادله رگرسیون، نمودار مرتبط با اثرات هر دو مؤلفه سرعت برش و عمق براده برداری به صورت دوگانه برای تنش هیدرواستاتیک در شکل ۷ ترسیم گردیده است.

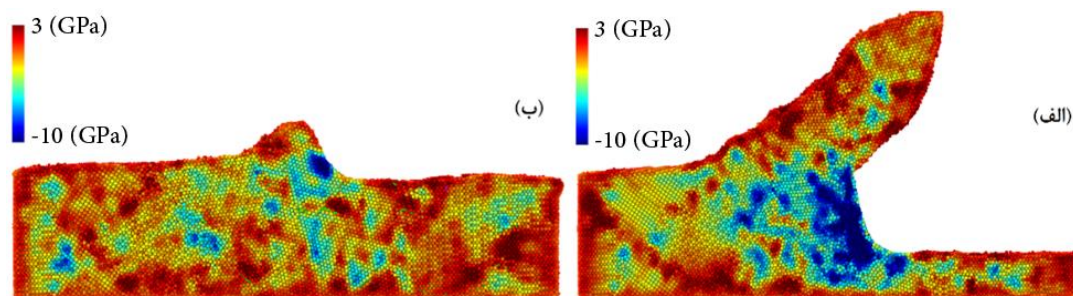


شکل ۷ تغییرات تنش هیدرواستاتیک بر حسب سرعت برش و عمق براده برداری

همان طور که در شکل ۷ قابل مشاهده است با افزایش سرعت برش و عمق براده برداری، تنش هیدرواستاتیک افزایش می یابد. افزایش تنش هیدرواستاتیک باعث ضعیف شدن مرزدانه های ماده پلی کریستال شده و آن را مستعد تغییر شکل و شکست در حین ماشین کاری می کند. این می تواند منجر به لغزش مرزدانه و ترک خوردگی مرزدانه شود و تغییر شکل پلاستیک را افزایش

دهد. همچنین تنش هیدرواستاتیک بالاتر می‌تواند تغییر شکل پلاستیک را با تسهیل حرکت نابجایی‌ها در داخل مواد افزایش دهد و این می‌تواند منجر به افزایش شکل‌پذیری و بهبود ماشین‌کاری شود [۲۳، ۲۲].

توزیع تنش هیدرواستاتیک آزمایش ۱ و ۳ به ترتیب در شکل ۸ قسمت الف و ب نشان داده شده است. با افزایش عمق براده برداری تنش هیدرو استاتیک افزایش می‌یابد. با افزایش عمق ماشین‌کاری، مواد در حال ماشین‌کاری در مواد یا بستر اطراف محصور می‌شوند و این محصور شدن، انبساط جانبی مواد را محدود می‌کند و منجر به افزایش تنش هیدرواستاتیک می‌شود [۲۴].



شکل ۸ توزیع تنش هیدرو استاتیک آزمایش ۱ (الف) (سرعت برش ۴۰۰ m/s و عمق‌های براده برداری ۵ nm) و (ب) ۳ (سرعت برش ۴۰۰ m/s و عمق‌های براده برداری ۵ nm)

#### ۴-۶- سطح پاسخ تنش ون میسر

تنش معادل ون میسر در دینامیک مولکولی برای ساختار با حجم مشخص به وسیله‌ی رابطه‌ی ۹ به دست می‌آید:

$$\sigma_v = \frac{\sum_{i=1}^N \left( \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2)} \right)}{\sqrt{2}V_{sub}} \quad (9)$$

$V_{sub}$  حجم ساختار معین جهت محاسبه تنش،  $N$  تعداد اتم‌ها موجود در ساختار است،  $\sigma_{xx}$ ،  $\sigma_{yy}$  و  $\sigma_{zz}$  مؤلفه‌ی نرمال تنش در راستای مختصات کارترین  $\sigma_{xy}$ ،  $\sigma_{yz}$  و  $\sigma_{xz}$  مؤلفه‌ی برشی تنش هستند. معادله رگرسیون تنش ون میسر بر اساس مؤلفه‌های سرعت برش و عمق براده‌برداری، رابطه ۱۰، از روش سطح پاسخ به دست آمده است.

$$\sigma_v = \beta_0 + \beta_1 V + \beta_2 D \quad (10)$$

پس از معرفی مدل رگرسیون تنش ون میسر، آنالیز واریانس عوامل ورودی بر طبق جدول ۹ انجام شده است.

جدول ۹ آنالیز واریانس سطح پاسخ تنش ون میسر

| Parameter         | DF | Adj SS  | Adj MS   | F-Value | P-Value |
|-------------------|----|---------|----------|---------|---------|
| Model             | ۵  | ۱/۱۱۴۴۰ | ۰/۲۲۲۸۸۱ | ۳۷/۵۲   | ۰/۰۰۷   |
| Linear            | ۲  | ۱/۰۵۶۳۳ | ۰/۵۲۸۱۶۷ | ۸۸/۹۲   | ۰/۰۰۲   |
| $V$               | ۱  | ۰/۶۴۰۲۷ | ۰/۶۴۰۲۶۷ | ۱۰۷/۷۹  | ۰/۰۰۲   |
| $D$               | ۱  | ۰/۴۱۶۰۷ | ۰/۴۱۶۰۶۷ | ۷۰/۰۵   | ۰/۰۰۴   |
| Square            | ۲  | ۰/۰۵۵۰۴ | ۰/۲۷۵۲۲  | ۴/۶۳    | ۰/۱۲۱   |
| $V^2$             | ۱  | ۰/۰۰۸۰۲ | ۰/۰۰۸۰۲۲ | ۱/۳۵    | ۰/۳۲۹   |
| $D^2$             | ۱  | ۰/۰۴۷۰۲ | ۰/۰۴۷۰۲۲ | ۷/۹۲    | ۰/۰۶۷   |
| 2-Way Interaction | ۱  | ۰/۰۰۳۰۲ | ۰/۰۰۳۰۲۵ | ۰/۵۱    | ۰/۵۲۷   |
| $VD$              | ۱  | ۰/۰۰۳۰۲ | ۰/۰۰۳۰۲۵ | ۰/۵۱    | ۰/۵۲۷   |
| Error             | ۳  | ۰/۰۱۷۸۲ | ۰/۰۰۵۹۴۰ |         |         |
| Total             | ۸  | ۰/۱۳۲۲۲ |          |         |         |

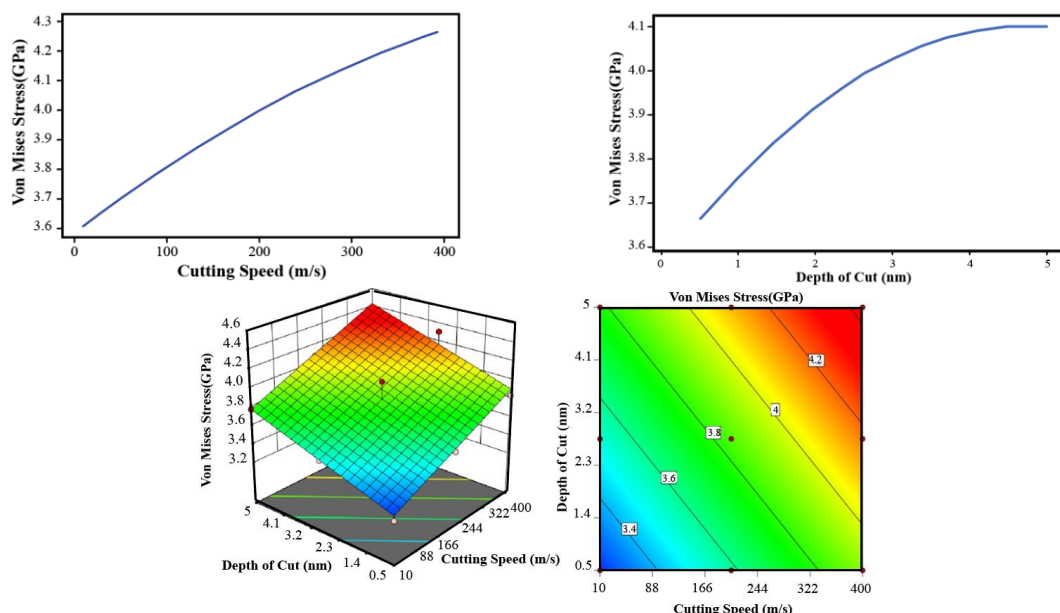
جدول ۹ آنالیز واریانس سطح پاسخ تنش ون میسر

| P-Value | F-Value | Adj MS   | Adj SS  | DF | Parameter         |
|---------|---------|----------|---------|----|-------------------|
| ۰/۰۰۷   | ۳۷/۵۲   | ۰/۲۲۲۸۸۱ | ۱/۱۱۴۴۰ | ۵  | Model             |
| ۰/۰۰۲   | ۸۸/۹۲   | ۰/۵۲۸۱۶۷ | ۱/۰۵۶۳۳ | ۲  | Linear            |
| ۰/۰۰۲   | ۱۰۷/۷۹  | ۰/۶۴۰۲۶۷ | ۰/۶۴۰۲۷ | ۱  | $V$               |
| ۰/۰۰۴   | ۷۰/۰۵   | ۰/۴۱۶۰۶۷ | ۰/۴۱۶۰۷ | ۱  | $D$               |
| ۰/۱۲۱   | ۴/۶۳    | ۰/۲۷۵۲۲  | ۰/۰۵۵۰۴ | ۲  | Square            |
| ۰/۳۳۹   | ۱/۳۵    | ۰/۰۰۸۰۲۲ | ۰/۰۰۸۰۲ | ۱  | $V^2$             |
| ۰/۰۶۷   | ۷/۹۲    | ۰/۰۴۷۰۲۲ | ۰/۰۴۷۰۲ | ۱  | $D^2$             |
| ۰/۵۲۷   | ۰/۵۱    | ۰/۰۰۳۰۲۵ | ۰/۰۰۳۰۲ | ۱  | 2-Way Interaction |
| ۰/۵۲۷   | ۰/۵۱    | ۰/۰۰۳۰۲۵ | ۰/۰۰۳۰۲ | ۱  | $VD$              |
|         |         | ۰/۰۰۵۹۴۰ | ۰/۰۱۷۸۲ | ۳  | Error             |
|         |         |          | ۰/۱۳۲۲۲ | ۸  | Total             |

مقدار  $R^2$ ،  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  این مدل به ترتیب ۰/۹۸۴۳، ۰/۹۵۸۰ و ۰/۸۲۴۱ می باشد. از آنجا که اختلاف بین  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  تقریباً کمتر از ۰/۲ می باشد، مدل ارائه شده مناسب است. اثر مؤلفه سرعت برش بر تنش ون میسر بیشتر می باشد. در نهایت ضرایب معادله سطح پاسخ به دست آمده طبق رابطه ۱۱ است:

$$\sigma_v = 2.9892 + 0.002530 \times V + 0.2965 \times D - 0.000063 \times V \times D - 0.000002 \times V^2 - 0.0303 \times D^2 \quad (11)$$

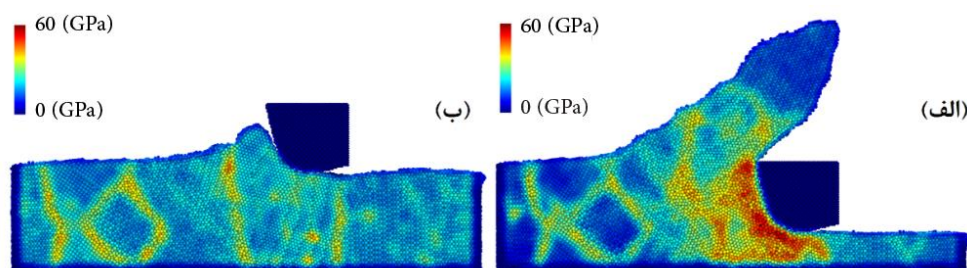
همان طور که در شکل ۹ قابل مشاهده است با افزایش سرعت برش و عمق براده برداری، تنش ون میسر افزایش می یابد. افزایش تنش ون میسر منجر به ایجاد و حرکت نابجایی در داخل ماده شده و وجود نابجایی، تغییر شکل پلاستیک را افزایش داده و این می تواند منجر به بهبود شکل دهی شده و حذف مواد را در حین نانوماشین کاری تسهیل کند. همچنین افزایش تنش ون میسر باعث لغزش مرز دانه شده که این مکانیزم نیز باعث کاهش مقاومت کلی در برابر تغییر شکل در حین نانوماشین کاری می شود.



شکل ۹ نمودار تغییرات تنش ون میسر بر حسب سرعت و عمق براده برداری

توزیع تنش ون میسر آزمایش ۱ و ۳ به ترتیب در شکل ۱۰ قسمت الف و ب نشان داده شده است. با افزایش عمق براده برداری تنش ون میسر افزایش می یابد. با افزایش عمق ماشین کاری، نابجایی های بیشتری تولید و انباشته می شود که منجر به چگالی بیشتر نابجایی ها می شود. این افزایش چگالی نابجایی باعث تغییر شکل بیشتر و به طبع منجر به سطوح کرنش بالاتر در

ماده می شود در نتیجه تنش ون میسر بیشتر می شود [۲۶، ۲۵].



شکل ۱۰ توزیع تنش ون میسر هیدرو استاتیک آزمایش ۱ (الف) (سرعت برش ۴۰۰ m/s و عمق های براده برداری 5nm) و (ب) ۳ (سرعت برش ۴۰۰ m/s و عمق های براده برداری ۰/۵ nm)

#### ۴-۷- سطح پاسخ دما

معادله رگرسیون دمای میانگین قطعه کار حین ماشین کاری برطبق رابطه ۱۲ به دست آمده است.

$$T = \beta_0 + \beta_1 V + \beta_2 D + \beta_{12} VD + \beta_{11} V^2 + \beta_{22} D^2 \quad (12)$$

پس از معرفی مدل رگرسیون دما، آنالیز واریانس عوامل ورودی برطبق جدول ۱۰ انجام شده است.

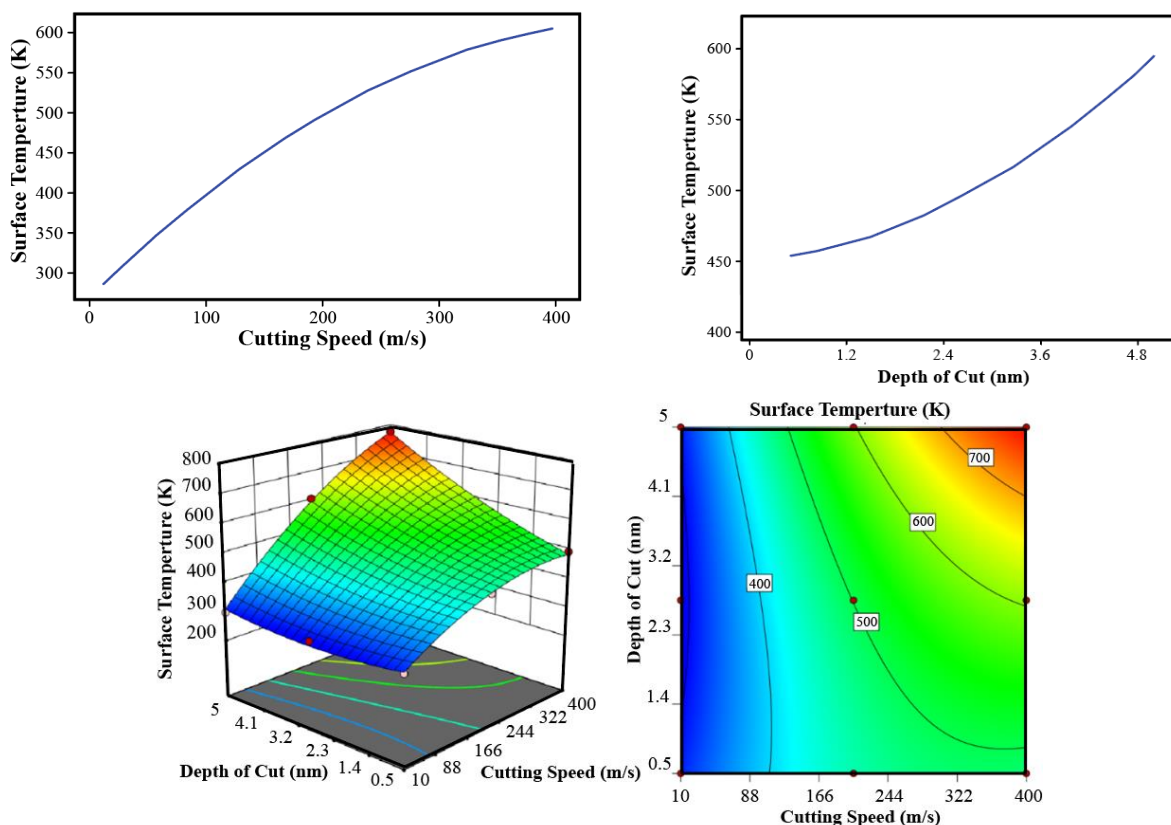
جدول ۱۰ آنالیز واریانس سطح پاسخ دما

| P-Value | F-Value | Adj MS | Adj SS | DF | Parameter         |
|---------|---------|--------|--------|----|-------------------|
| ۰/۰۰۱   | ۱۷۵/۲۴  | ۴۲۱۱۵  | ۲۱۰۵۷۵ | ۵  | Model             |
| ۰/۰۰۰   | ۳۷۸/۱۵  | ۹۰۸۸۰  | ۱۸۱۷۵۹ | ۲  | Linear            |
| ۰/۰۰۰   | ۶۳۰/۶۷  | ۱۵۱۵۶۸ | ۱۵۱۵۶۸ | ۱  | $V$               |
| ۰/۰۰۲   | ۱۲۵/۶۲  | ۳۰۱۹۱  | ۳۰۱۹۱  | ۱  | $D$               |
| ۰/۰۲۷   | ۱۵/۱۰   | ۳۶۲۹   | ۷۲۵۸   | ۲  | Square            |
| ۰/۰۱۵   | ۲۵/۲۵   | ۶۰۶۹   | ۶۰۶۹   | ۱  | $V^2$             |
| ۰/۱۱۳   | ۴/۹۵    | ۱۱۸۹   | ۱۱۸۹   | ۱  | $D^2$             |
| ۰/۰۰۲   | ۸۹/۷۰   | ۲۱۵۵۸  | ۲۱۵۵۸  | ۱  | 2-Way Interaction |
| ۰/۰۰۲   | ۸۹/۷۰   | ۲۱۵۵۸  | ۲۱۵۵۸  | ۱  | $VD$              |
|         |         | ۲۴۰    | ۷۲۱    | ۳  | Error             |
|         |         |        | ۲۱۱۲۹۶ | ۸  | Total             |

معادله انتخابی مرتبه دوم و مقدار  $R^2$ ،  $R_{adj}^2$  و  $R_{pre}^2$  این مدل به ترتیب ۰/۹۹۶۶، ۰/۹۹۰۹ و ۰/۹۶۰۵ می باشد. از آنجاکه اختلاف بین  $R_{pre}^2$  و  $R_{adj}^2$  تقریباً کمتر از ۰/۲ درصد می باشد، مدل ارائه شده مناسب است. با توجه به جدول ۱۰ عوامل مؤثر مؤلفه های  $VD$ ،  $V$ ،  $D$  و  $V^2$  می باشند. اثر مؤلفه سرعت بر دما بیشتر می باشد. در نهایت مدل سطح پاسخ دما و ضرایب معادله آن به شکل رابطه ۱۳ محاسبه شده است.

$$T = 317.22132 + 0.948916 \times V - 29.26305 \times D + 0.167322 \times V \times D - 0.001449 \times V^2 + 4.81613 \times D^2 \quad (13)$$

همان طور که در شکل ۱۱ قابل مشاهده است با افزایش سرعت برش و عمق براده برداری، دما افزایش می یابد. افزایش عمق براده برداری و سرعت برش در نانوماشین کاری می تواند تغییر شکل پلاستیک قابل توجهی را در آلیاژ ایجاد کند. تغییر شکل پلاستیک شامل حرکت و بازآرایی اتم ها است که منجر به اتلاف انرژی به شکل گرما می شود. هر چه سرعت برش و عمق براده برداری بیشتر باشد، تغییر شکل پلاستیک شدیدتر و در نتیجه افزایش دما بیشتر می شود [۲۸، ۲۷].



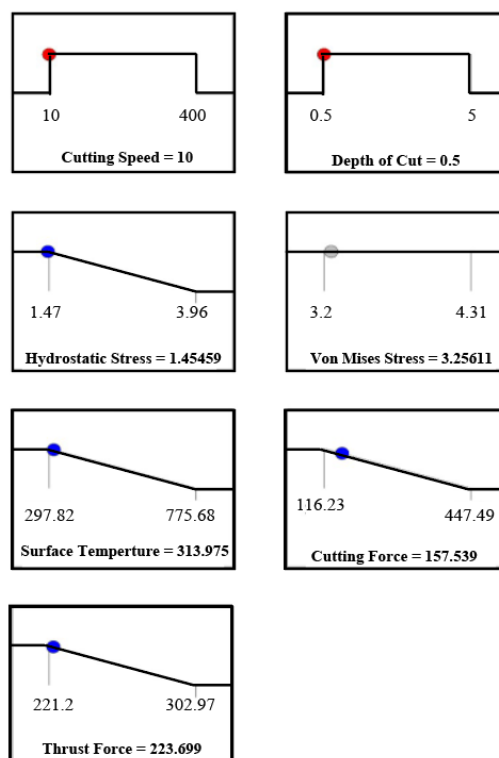
شکل ۱۱ تغییرات دما بر اساس سرعت و عمق براده برداری

#### ۴-۸- بهینه سازی

بهینه سازی در فرآیند نانوماشین کاری آلیاژ پایه نیکل، از طریق مؤلفه های تأثیرگذار یعنی نیروهای ماشین کاری و دما انجام شده است و تنش هیدرو استاتیک و تنش ون میسز بیشتر برای بررسی ساختار مورد استفاده قرار خواهند گرفت [۲۹]. دلیل انتخاب این معیارها، کمینه نمودن سایش ابزار می باشد. بدین منظور برای رسیدن به کمترین آسیب به ابزار احتیاج است که به ترتیب نیروهای ماشین کاری و دما کمترین مقدار خود را داشته باشند. روش انجام فرآیند بهینه سازی بر اساس روش تپه نوردی انجام می گیرد. الگوریتم تپه نوردی الگوریتمی است که به طور مداوم به سمت بالا حرکت می کند تا زمانی که بهترین راه حل حاصل شود و سپس با رسیدن به اوج به پایان می رسد. این الگوریتم دارای یک گره است که شامل دو قسمت حالت و مقدار است. این کار با یک حالت غیر بهینه (پایه تپه) آغاز می شود و این حالت را تا رسیدن به پیش شرط خاصی ارتقاء می دهد. از تابع اکتشافی به عنوان مبنای این پیش شرط استفاده می شود. هدف این الگوریتم دستیابی به یک حالت مطلوب است که ارتقاء وضعیت موجود باشد [۳۰]. نرم افزار مورد استفاده نرم افزار دیزاین اکسپرت می باشد. پس از اعمال تمامی شرایط، نتایج بهینه سازی در شکل ۱۲ نمایش داده شده اند.

در بهینه سازی حاضر، توابع هدف شامل به حداقل رساندن نیروی برش، به حداقل رساندن نیروی عمودی و به حداقل رساندن دمای قطعه کار است. متغیرهای طراحی شامل سرعت و عمق براده برداری هستند.

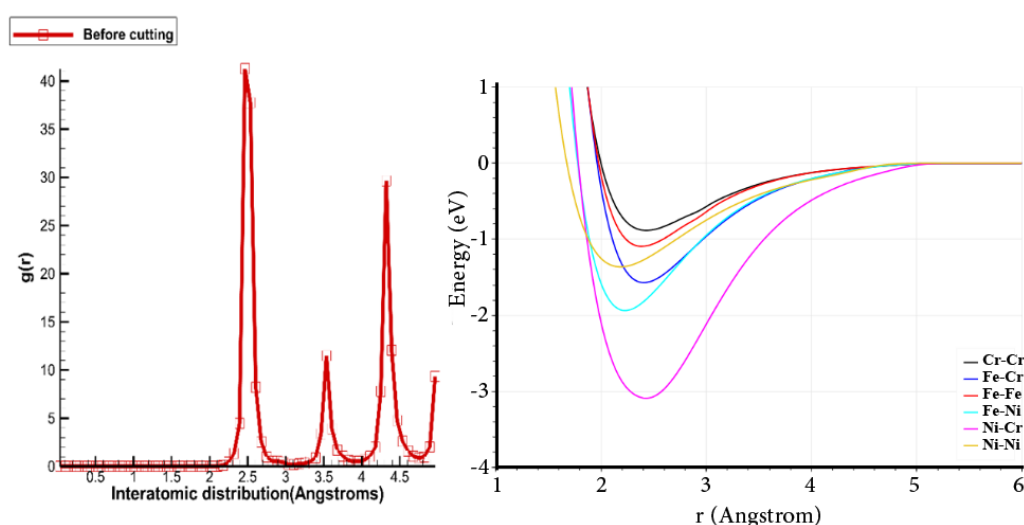
با توجه به شکل ۱۲ مشاهده می گردد که بهینه ترین حالت ممکن در شبیه سازی های صورت گرفته در این تحقیق زمانی رخ می دهد که مقدار سرعت برش ۱۰ متر بر ثانیه و عمق براده برداری ۰/۵ نانومتر می باشد، از آنجایی که تنش هیدرو استاتیک تابع سرعت برش و عمق براده برداری می باشد حالت بهینه تنش هیدرو استاتیک نیز دارای مقدار کمینه می باشد.



شکل ۱۲ نمودارهای بهینه‌سازی فرآیند نانوماشین‌کاری آلیاژ پایه نیکل-آهن-کروم

#### ۹-۴- بررسی تغییرات ساختاری

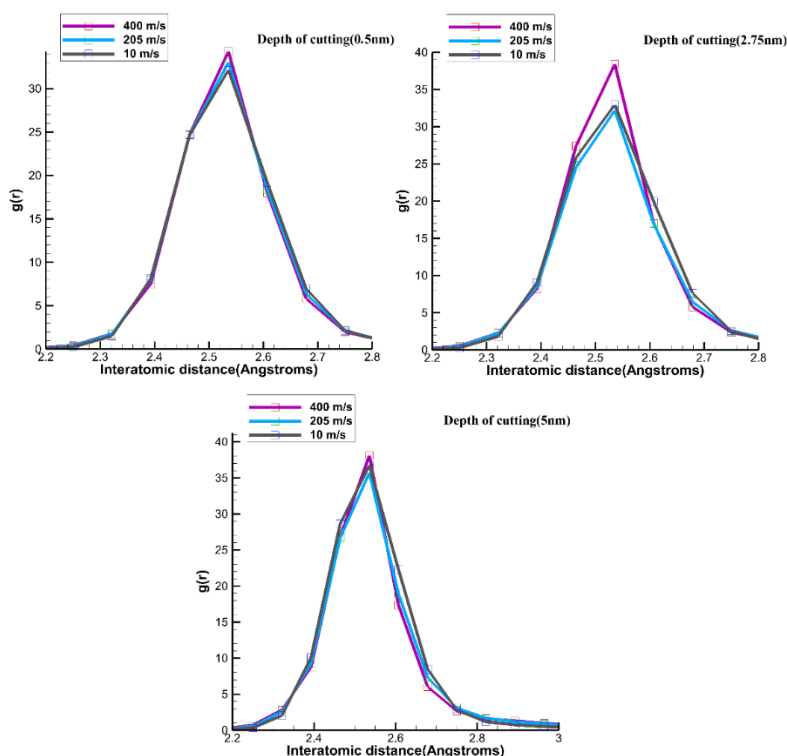
برای بررسی تغییرات ساختاری قطعه کار بر اثر فرآیند نانوماشین‌کاری از معیار تابع توزیع تنش استفاده شده است. این تابع معیاری برای تغییرات ساختاری و میزان پراکندگی اتمی است که با محاسبه چگالی تعداد اتم‌های موجود در حول یک اتم خاص محاسبه می‌شود [۳۱]. برای نانوماشین‌کاری نیکل-آهن-کروم تابع توزیع شعاعی برای طول پیوندهای بین اتم‌های مختلف تعریف شده و از طرفی به دلیل این که تعداد این طول‌های پیوند مختلف و زیاد می‌باشد این تابع توزیع شعاعی به صورت میانگین و کلی محاسبه می‌شود [۳۲]. در شکل ۱۳ تابع توزیع شعاعی قطعه کار قبل از ماشین‌کاری و بر حسب فاصله‌ی بین‌اتمی رسم گردیده است.



شکل ۱۳ تابع توزیع شعاعی قطعه کار قبل از ماشین‌کاری

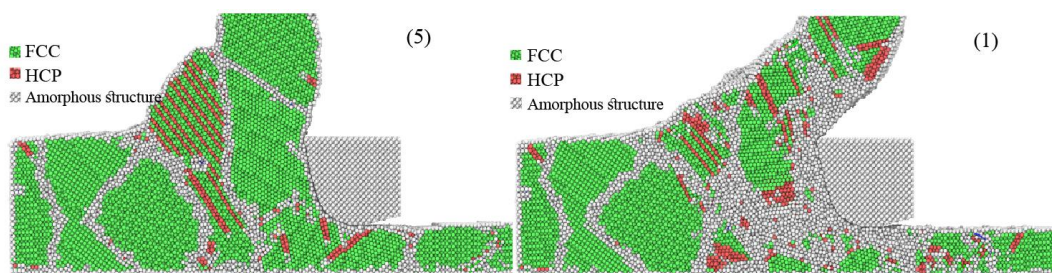
بعد از فرآیند نانوماشین‌کاری برای طول پیوند بین ۲/۲ و ۲/۶ برای سرعت‌های برش ۴۰۰، ۲۰۵ و ۱۰ متر بر ثانیه و عمق‌های

براده‌برداری ۰/۵، ۲/۷۵ و ۵ نانومتر میانگین چگالی در شکل ۱۴ رسم شده است.



شکل ۱۴ نمودار مقایسه‌ی تابع توزیع شعاعی بعد از فرایند نانوماشین‌کاری

با توجه به شکل ۱۴ مشاهده می‌شود با افزایش سرعت، تابع توزیع شعاعی یا همان چگالی افزایش می‌یابد که این افزایش چگالی باعث افزایش تغییرات ساختاری می‌شود. همچنین هنگامی که چگالی افزایش می‌یابد فاصله بین‌اتمی در نواحی مختلف کم شده و فشردگی اتمی در سرعت‌های بالا بیشتر می‌باشد. و نیز زمانی که سرعت افزایش می‌یابد جابه‌جایی اتم‌ها در جلوی ابزار افزایش می‌یابد و این جابه‌جایی به دلیل ساکن بودن لایه بعدی سبب فشردگی در جلوی ابزار و افزایش چگالی می‌شود که این افزایش چگالی سبب تغییرات فازی بیشتر می‌شود، که در شکل ۱۵ نشان داده شده است.



شکل ۱۵ تغییرات ساختار آزمایش ۱ (سرعت برش ۴۰۰ m/s و عمق‌های براده‌برداری ۵nm) و ۵ (سرعت برش ۱۰ m/s و عمق‌های براده‌برداری ۵nm) در طول فرایند نانوماشین‌کاری

## ۵- نتیجه‌گیری

این پژوهش به منظور بررسی اثر مؤلفه‌های سرعت برش و عمق براده‌برداری در فرایند نانوماشین‌کاری آلیاژ نیکل-آهن-کروم چند کریستال انجام شده است و شبیه‌سازی انجام شده به روش دینامیک مولکولی صورت گرفته است. پس از انجام شبیه‌سازی‌های انتخاب شده توسط فرایند طراحی آزمایش، به تحلیل رفتار این فرایند بر اساس مؤلفه‌های سرعت برش و عمق براده‌برداری و یافتن معادلات رگرسیون نتایج، پرداخته شده است. پاسخ بهینه یافته شده از این فرایند و تغییرات ساختاری بر اساس معیار تابع توزیع شعاعی بررسی شده است. نتایج به این شرح به دست آمده که مقدار نیروی برشی ماشین‌کاری با افزایش

عمق براده برداری و سرعت برش از  $152/42$  به  $447/49$  (ev/A) افزایش یافته است. مقدار نیروی عمودی ماشین کاری با افزایش عمق براده برداری و سرعت برش از  $221/20$  به  $289$  (ev/A) افزایش می یابد و این افزایش نیروها در سرعت های بالاتر با شدت و شیب بیشتر روبرو می باشد. همچنین مقدار تنش ون میسز با افزایش عمق براده برداری و سرعت برش از  $3/2$  به  $4/3$  گیگاپاسکال روند افزایشی داشته است. با افزایش عمق براده برداری و سرعت برش تنش هیدرواستاتیک افزایش یافته، بنابراین ساختار دچار تغییرات فازی از جمله در ناحیه پیشانی ابزار در قطعه کار شده است. و نیز با افزایش سرعت برش فرآیند نانوماشین کاری تغییرات ساختاری قطعه کار افزایش می یابد. با افزایش سرعت برش و عمق براده برداری، دما افزایش می یابد و باعث تسهیل در تغییر شکل پلاستیک آلیاژ می شود.

## ۶- فهرست علائم

|             |                     |              |                              |
|-------------|---------------------|--------------|------------------------------|
| $F_c$       | نیروی برش           | D            | عمق براده برداری             |
| $F_t$       | نیروی عمودی         | V            | سرعت برش                     |
| $S_{hydro}$ | تنش هیدرواستاتیک    | T            | دما                          |
| $V_{sub}$   | حجم زیرساختار       | $\beta_i$    | ضریب خطی معادله رگرسیون      |
| N           | تعداد اتم های موجود | $\beta_{ij}$ | ضریب درجه دوم معادله رگرسیون |
| $\sigma_v$  | تنش معادل ون میسز   | $\beta_0$    | ضریب درجه صفر معادله رگرسیون |

## Authorship Contribution Statement

### Dr. Mojtaba Zolfaghari



**Biography:** Associate Professor, School of Mechanic Engineering, Arak University, Arak, Iran

**Contribution Statement:** Conceptualization, Methodology, Formal analysis, Investigation, review & editing, Project administration, Supervision.

### Hamed Heydari



**Biography:** Ph.D. Student, School of Mechanic Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

**Contribution Statement:** Methodology, Validation, Formal analysis, Software, Visualization, Writing – original draft, Resources, Investigation.

### Mohammad Javad Ghasemi



**Biography:** MSc, School of Mechanic Engineering, Arak University, Arak, Iran

**Contribution Statement:** Conceptualization, Investigation, Software, Writing – original draf

### Dr. Vahid Tahmasbi



**Biography:** Department of Mechanical Engineering, Arak University of Technology, Arak, Iran.

**Contribution Statement:** Methodology, Supervision, Software.

## ۷- مراجع

- [1] Oluwajobi AO. Nanomachining technology development: University of Huddersfield, 2012.
- [2] Brinksmeier E, Aurich J, Govekar E, Heinzel C, Hoffmeister H-W, Klocke F, et al. Advances in modeling and simulation of grinding processes. *CIRP annals*. 2006;55:667-96.
- [3] Hao Z, Cui R, Fan Y, Lin J. Diffusion mechanism of tools and simulation in nanoscale cutting the Ni-Fe-Cr series of Nickel-based superalloy. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2019;150:625-36.
- [4] Fang T-H, Weng C-I. Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale. *Nanotechnology*. 2000;11:148.
- [5] Ye Y, Biswas R, Morris J, Bastawros A, Chandra A. Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper. *Nanotechnology*. 2003;14:390.
- [6] Pei Q, Lu C, Lee H. Large scale molecular dynamics study of nanometric machining of copper. *Computational Materials Science*. 2007;41:177-85.
- [7] Zhu P-z, Hu Y-z, Ma T-b, Wang H. Study of AFM-based nanometric cutting process using molecular dynamics. *Applied Surface Science*. 2010;256:7160-5.
- [8] Shi J, Wang Y, Yang X. Nano-scale machining of polycrystalline coppers-effects of grain size and machining parameters. *Nanoscale research letters*. 2013;8:1-18.
- [9] Fan Y, Wang W, Hao Z, Zhan C. Work hardening mechanism based on molecular dynamics simulation in cutting Ni-Fe-Cr series of Ni-based alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. 2020;819:153331.
- [10] Hao Z, Zhang H, Fan Y. Cutting performance of the nanotwinned cBN tool in nano-cutting of Ni-Cr-Fe alloy. *Journal of Manufacturing Processes*. 2023;95:521-34.
- [11] Zhaopeng H, Zaizhen L, Yihang F. Study on the evolution mechanism of subsurface defects in nickel-based single crystal alloy during atomic and close-to-atomic scale cutting. *Journal of Manufacturing Processes*. 2021;68:14-33.
- [12] Hao Z, Lou Z, Fan Y. Study on phase transformation in cutting Ni-base superalloy based on molecular dynamics method. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*. 2021;235:2065-86.
- [13] Doan D-Q, Fang T-H, Chen T-H. Nanomachining characteristics of textured polycrystalline NiFeCo alloy using molecular dynamics. *Journal of Manufacturing Processes*. 2022;74:423-40.
- [14] Garner E, Kolken HM, Wang CC, Zadpoor AA, Wu J. Compatibility in microstructural optimization for additive manufacturing. *Additive Manufacturing*. 2019;26:65-75.
- [15] Dai H, Chen G. A molecular dynamics investigation into the mechanisms of material removal and subsurface damage of nanoscale high speed laser-assisted machining. *Molecular Simulation*. 2017;43:42-51.
- [16] Pei Q, Lu C, Fang F, Wu H. Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*. 2006;37:434-41.
- [17] Ikawa N, Shimada S, Tanaka H, Ohmori G. An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning. *CIRP annals*. 1991;40:551-4.
- [18] Montgomery DC. Design and analysis of experiments: John wiley & sons, 2017.
- [19] Klamecki BE. Comparison of material removal rate models and experimental results for the double-sided polishing process. *Journal of Materials Processing Technology*. 2001;109:248-53.

- [20] Sai L, Bouzid W. Influence of velocity profile on the chip thickness and material removal rate in milling. *International Journal of Machining and Machinability of Materials*. 2014;16:65-79.
- [21] Dai H, Zhang F, Chen J. A study of ultraprecision mechanical polishing of single-crystal silicon with laser nano-structured diamond abrasive by molecular dynamics simulation. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2019;157:254-66.
- [22] Hu J, Zhuang Z, Liu F, Liu X, Liu Z. Investigation of grain boundary and orientation effects in polycrystalline metals by a dislocation-based crystal plasticity model. *Computational materials science*. 2019;159:86-94.
- [23] Greenwood G, Jones H, Woodhead J. The effect of hydrostatic pressure on the binding energy of gas bubbles to grain boundaries and phase interfaces. *Philosophical Magazine*. 1975;31:39-46.
- [24] Li W, Withers PJ, Preuss M, Shackleton J, Andrews P. Depth and lateral variation of machining-induced residual stress for a nickel base superalloy. *Materials Science Forum: Trans Tech Publ*; 2011. 332-9.
- [25] Zhang J, Sun T, Yan Y, Liang Y, Dong S. Molecular dynamics investigation of incipient plasticity during nanomachining of Cu (111) surface. *International Journal of Nanomanufacturing*. 2011;7:559-66.
- [26] Koslowski M, Strachan A. Uncertainty propagation in a multiscale model of nanocrystalline plasticity. *Reliability Engineering & System Safety*. 2011;96:1161-70.
- [27] Ovid'ko IA. Plastic deformation mechanisms in nanocrystalline metallic materials. *De Gruyter*; 2013. 81-8.
- [28] Chu C-Y, Tan C-M. Deformation analysis of nanocutting using atomistic model. *International Journal of Solids and Structures*. 2009;46:1807-14.
- [29] Andrianopoulos NP, Pikrakis A. On the effect of hydrostatic stress on fatigue crack propagation. *International Journal of Structural Integrity*. 2017;8:240-55.
- [30] Al-Betar MA.  $\beta$ -hill climbing: an exploratory local search. *Neural Computing and Applications*. 2017;28:153-68.
- [31] Liu Y, Li B, Kong L. A molecular dynamics investigation into nanoscale scratching mechanism of polycrystalline silicon carbide. *Computational materials science*. 2018;148:76-86.
- [32] Sukhomlinov SV, Müser MH. Determination of accurate, mean bond lengths from radial distribution functions. *The Journal of chemical physics*. 2017;146.