

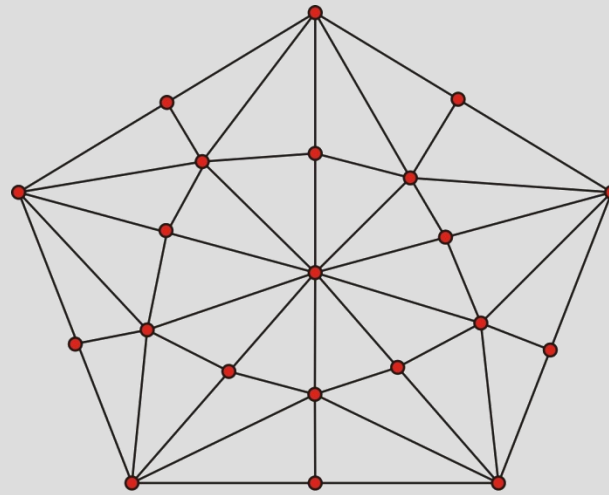


Modelowanie Wieloskalowe

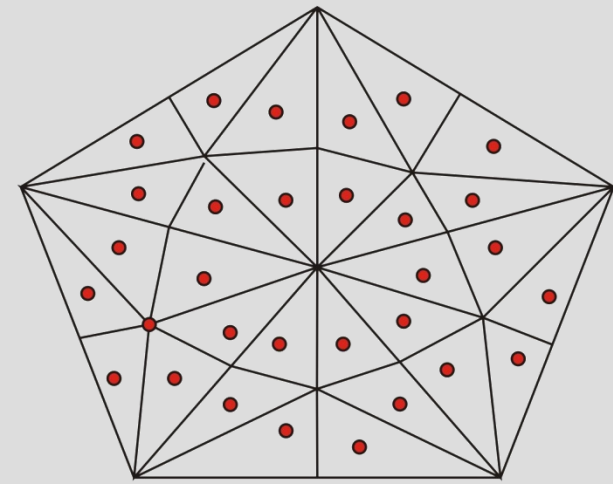
Modele naprężenia uplastyczniającego w ujęciu symulacji numerycznej

Dr hab. inż. **Łukasz Madej**, prof. AGH
Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania
Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

Budynek B5
p. 716
lmadej@agh.edu.pl
home.agh.edu.pl/lmadej

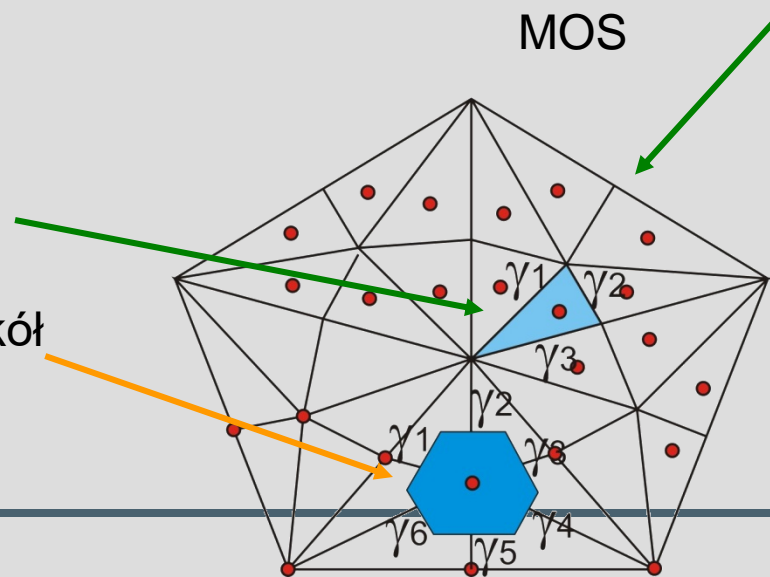


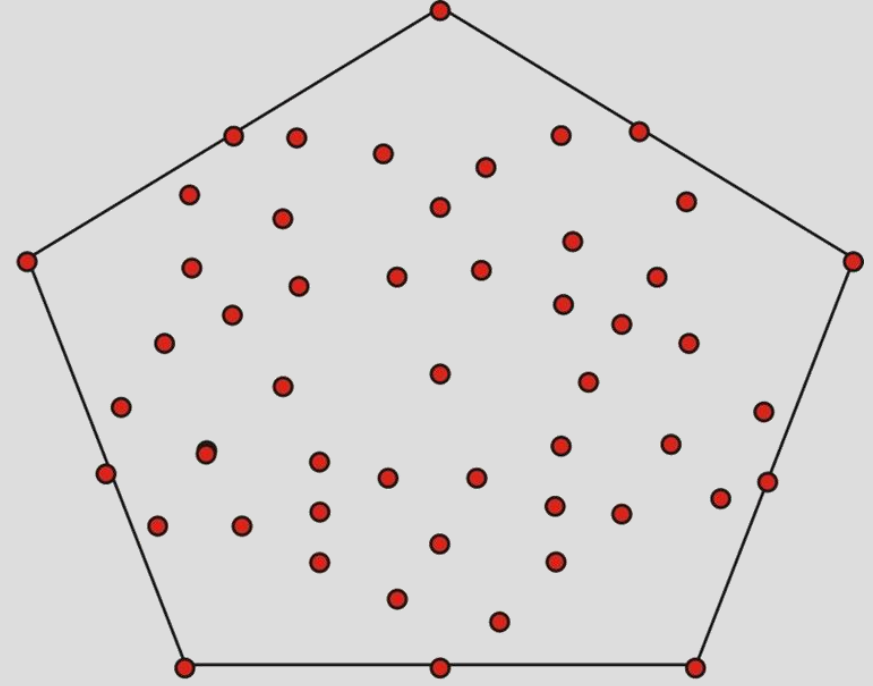
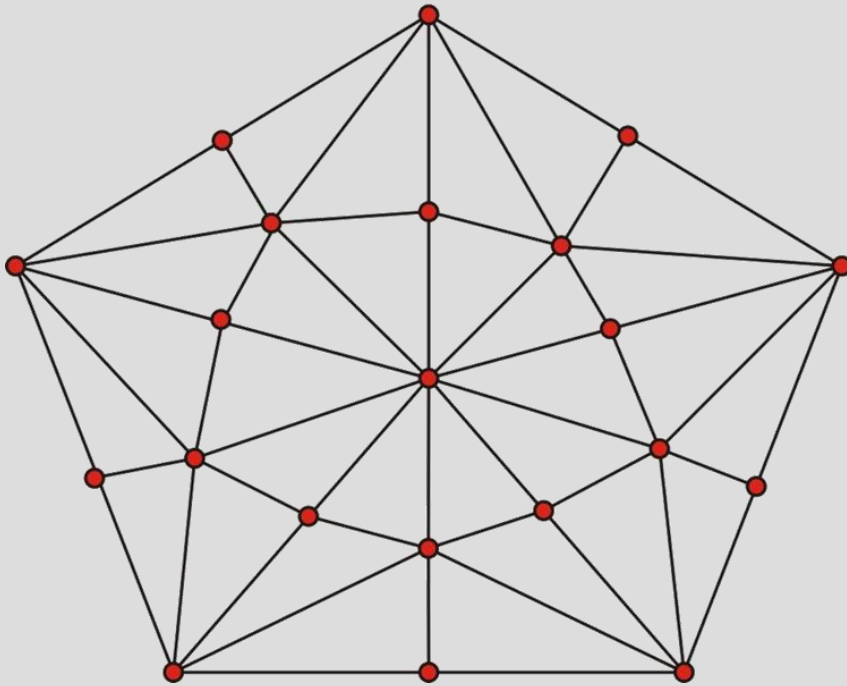
MES



MOS

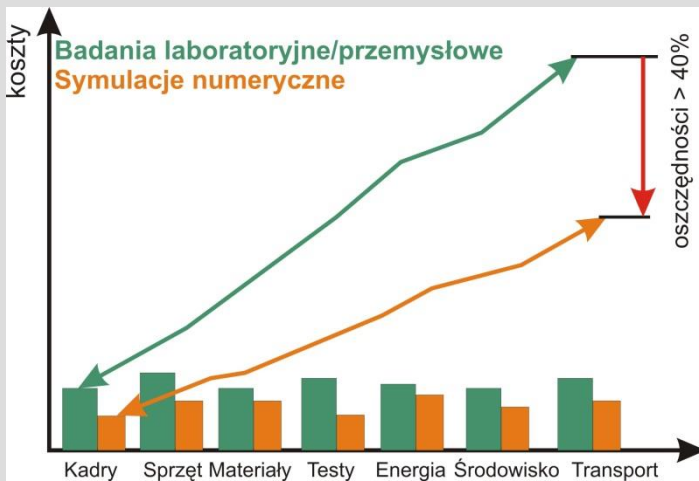
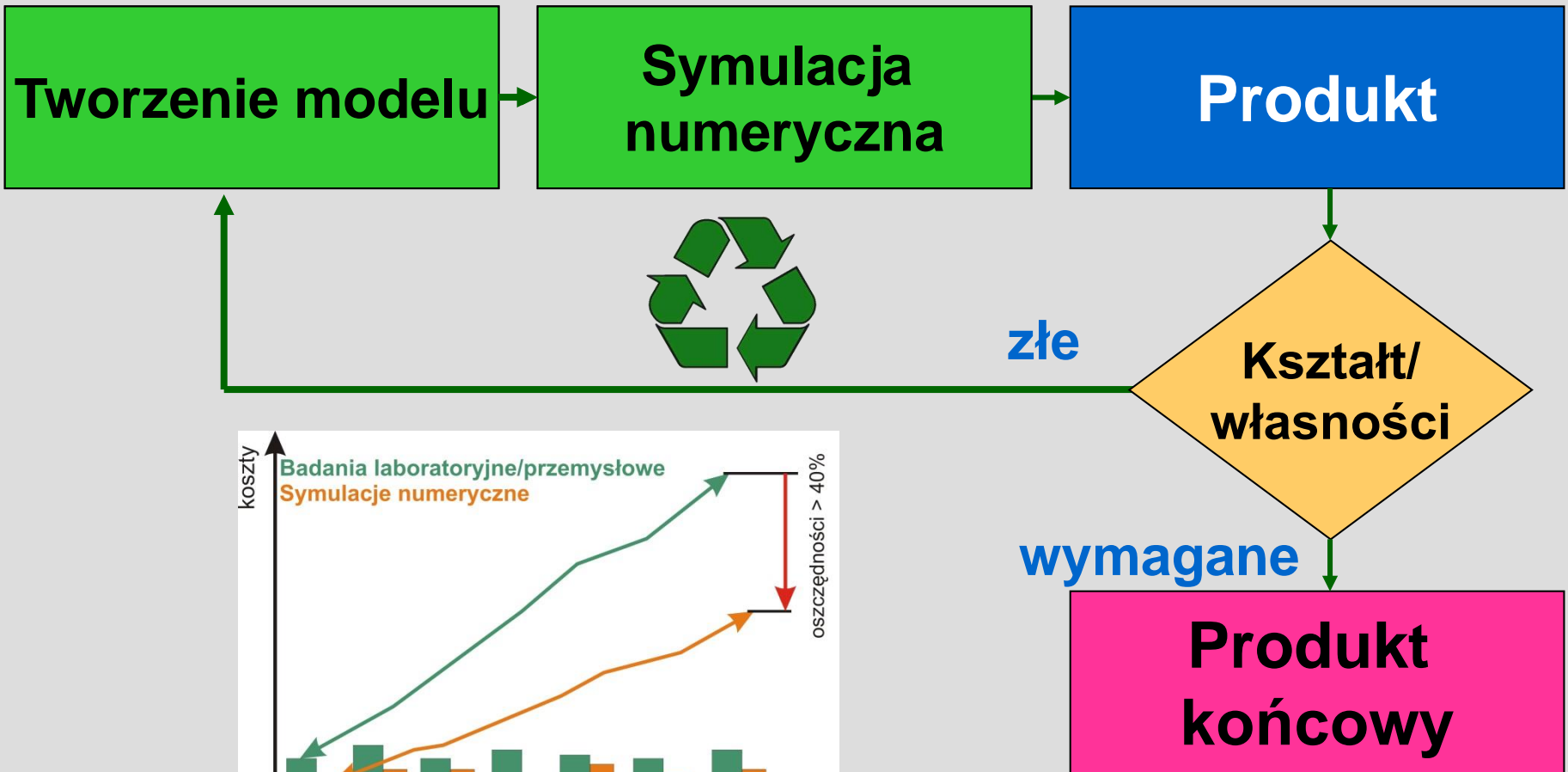
- obszar kontrolny równoważny jest komórce siatki
- obszar kontrolny zbudowany jest wokół węzła siatki

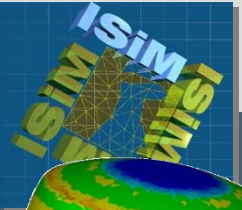




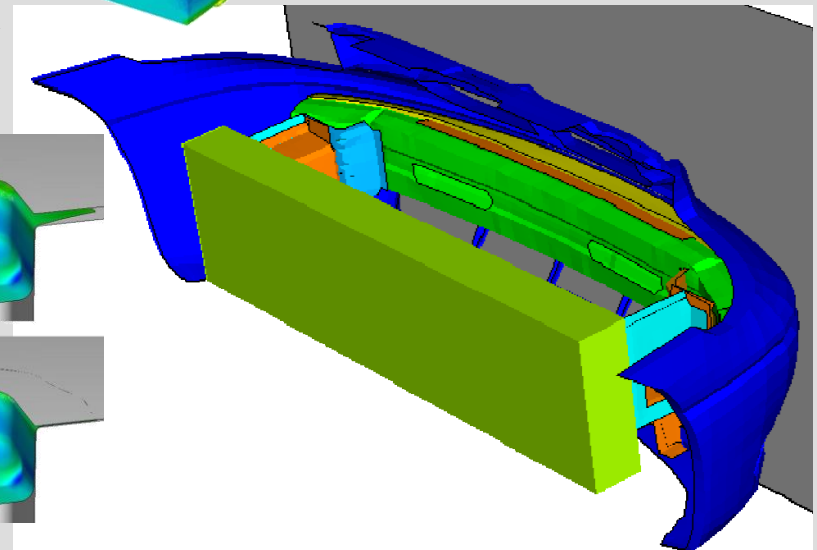
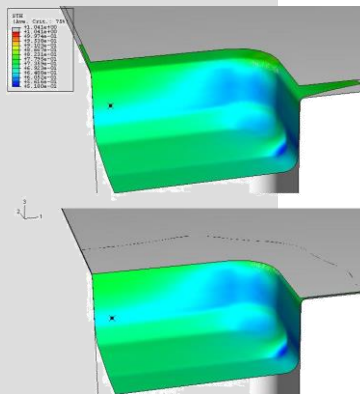
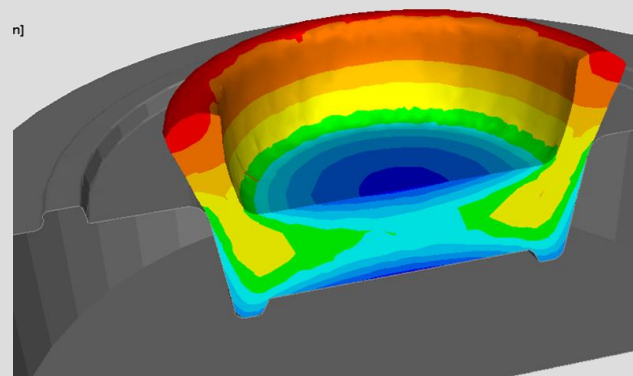
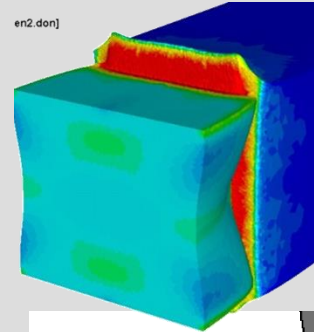
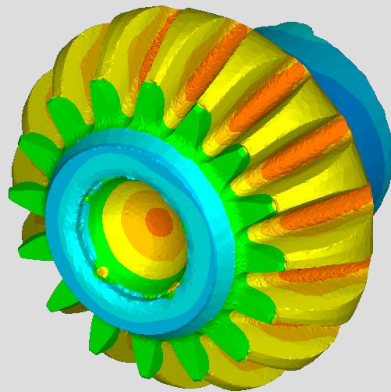
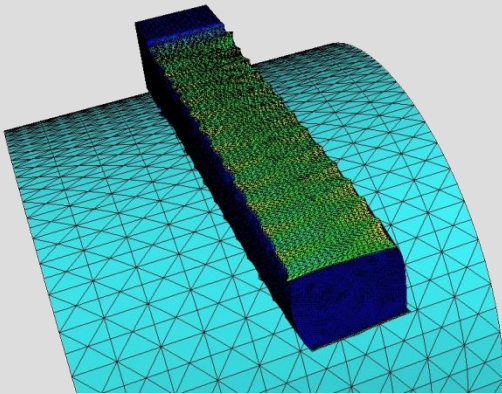
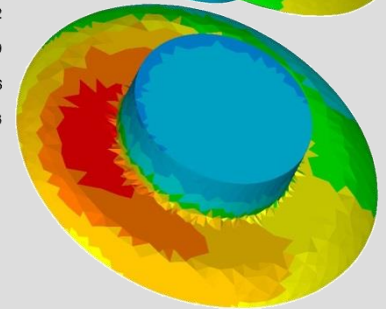
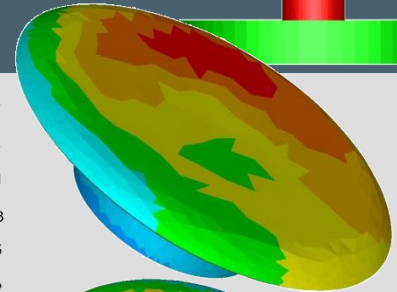
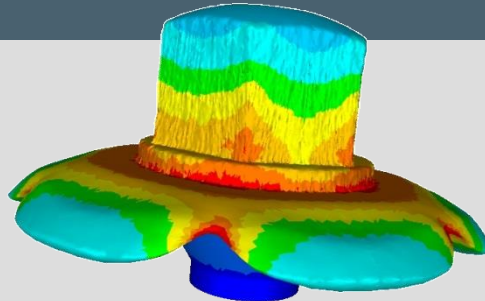
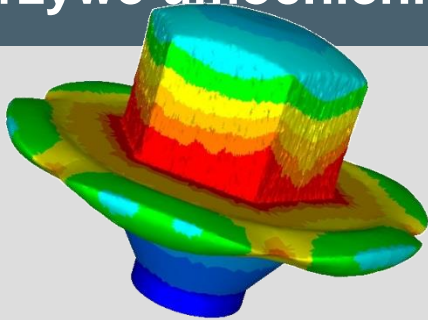
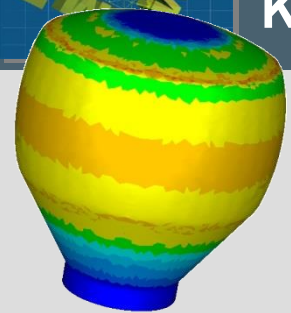
Metody bezsiatkowe do reprezentacji problemu używają zbioru węzłów rozproszonych w dziedzinie problemu, jak i na granicach dziedziny.

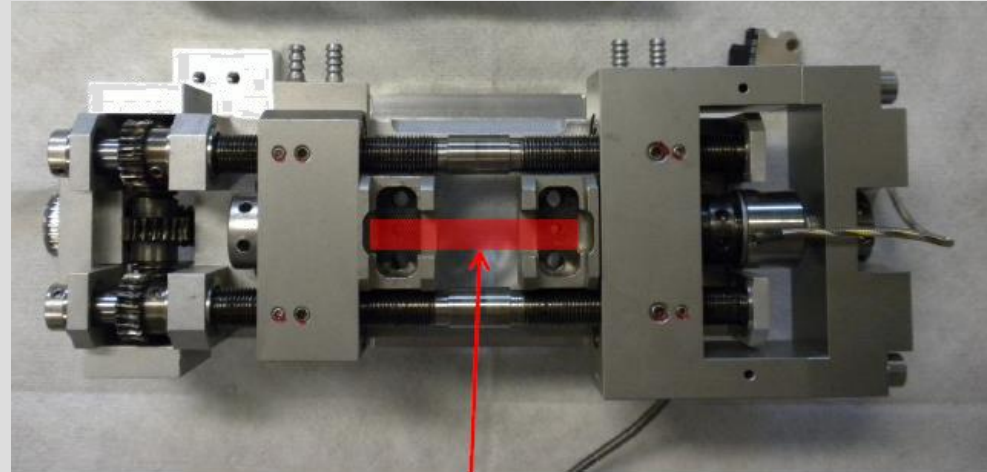
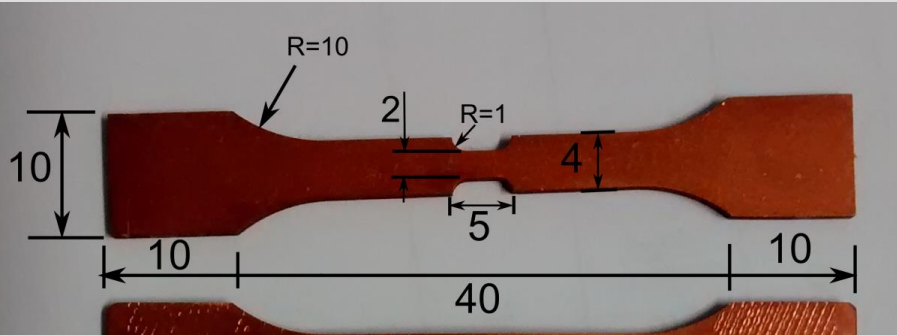




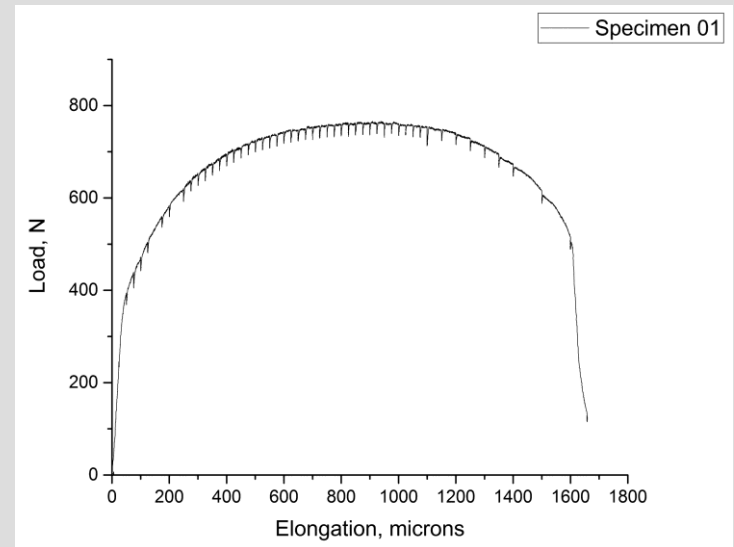
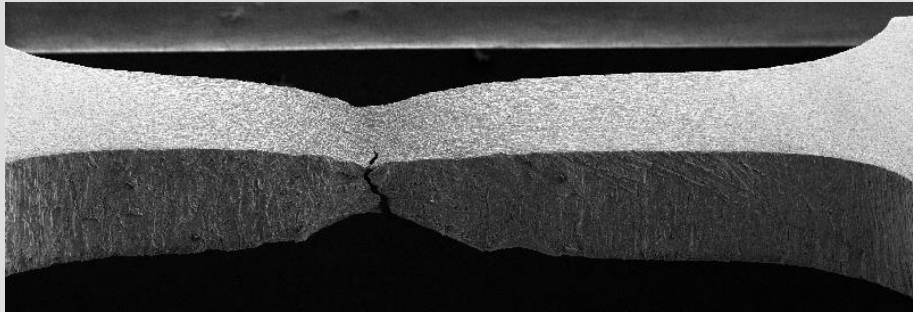


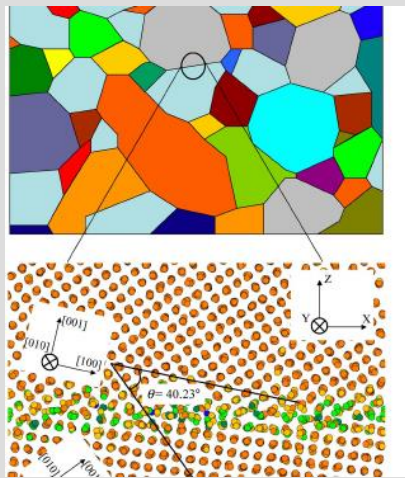
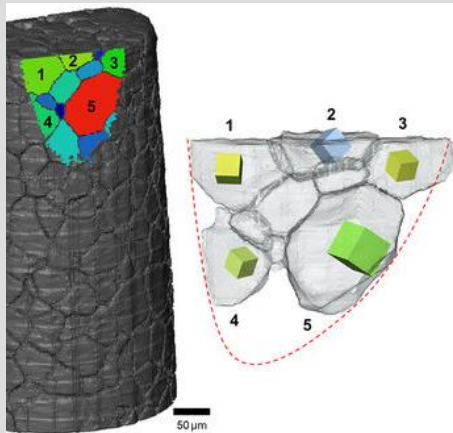
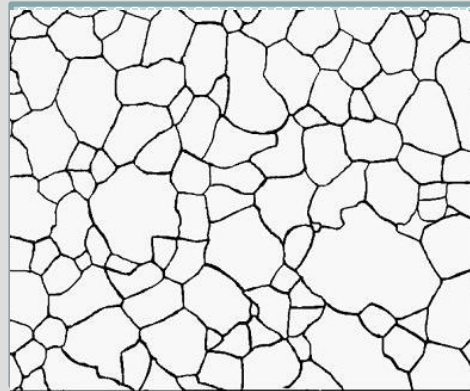
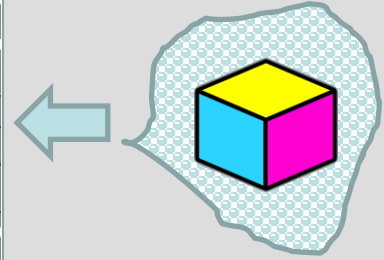
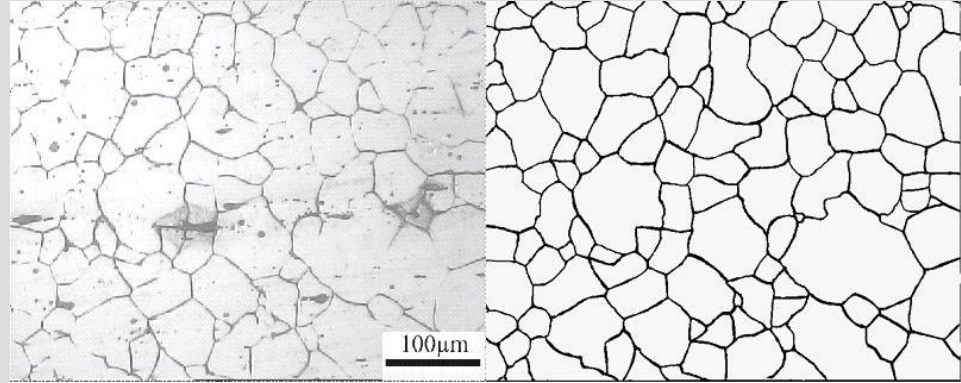
Krzywe umocnienia

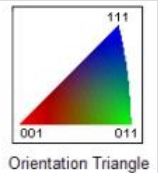
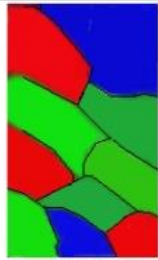
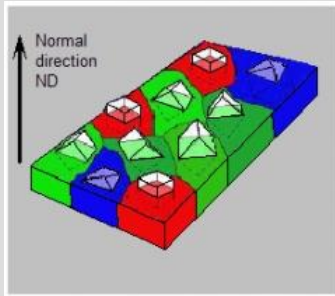




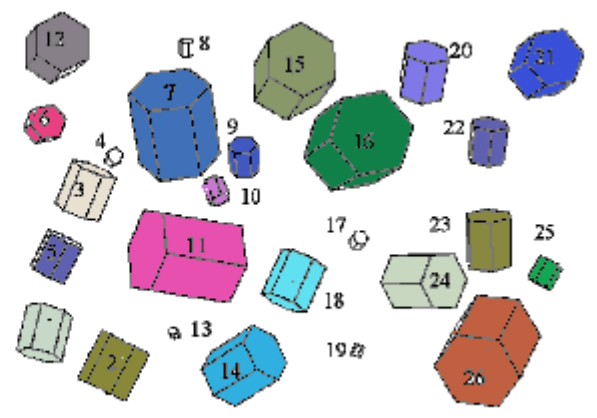
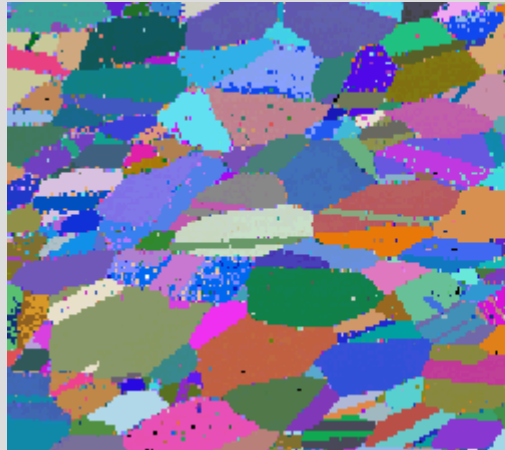
Sample Position





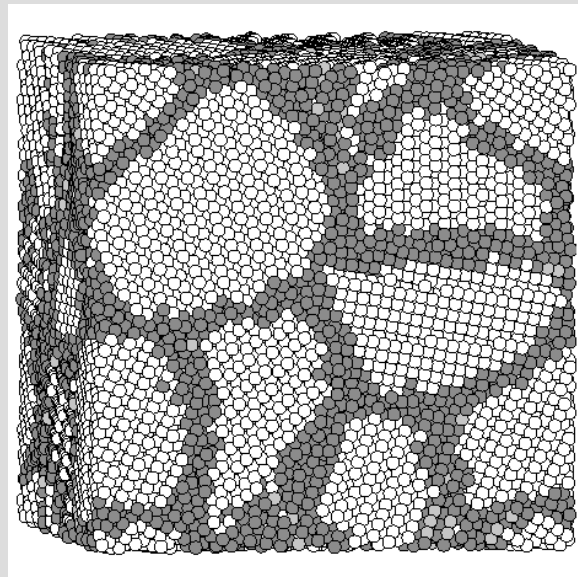


Miller Map <uvw>

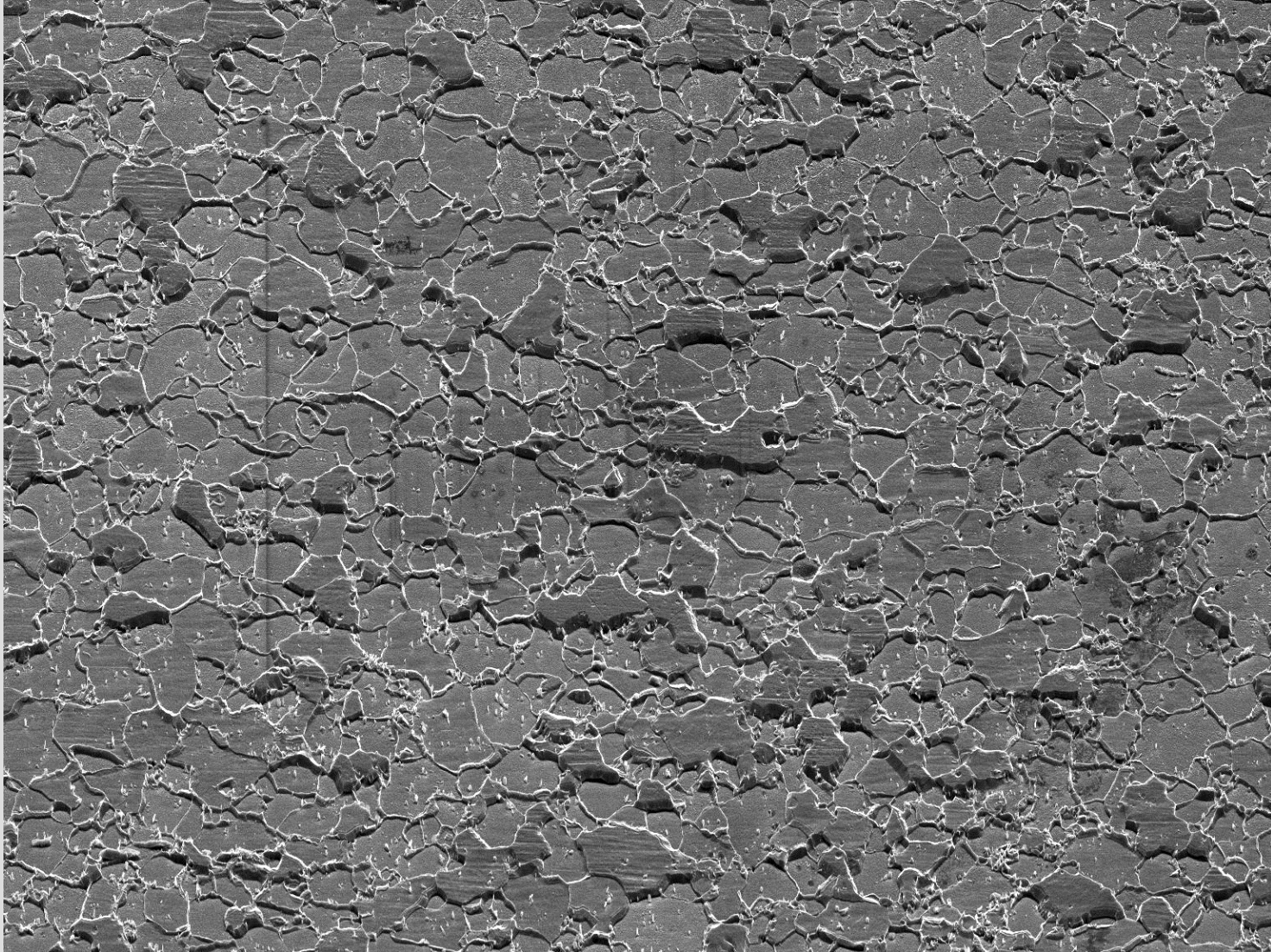


Ebsd.info

www.texture.de



legacy.virtualexplorer.com.au





Równanie konstytutywne

stanowi relacje pomiędzy dwiema wielkościami fizycznymi charakterystycznymi dla danego materiału lub substancji, mają charakter fenomenologiczny lub wyprowadzane są z zasad pierwszych.

Tarcie

$$F_f = F_p \mu_f$$

Elektryczność

$$P_j = \varepsilon_0 \chi_{ij} E_i$$

$$D_j = \varepsilon_{ij} E_i$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

Magnetyzm

$$M_j = \mu_0 \chi_{m,ij} H_i$$

$$B_j = \mu_{ij} H_i$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

Pojemność cieplna

$$q = c_p T$$

Dyfuzja

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot D(\phi) \nabla \phi(\vec{r}, t)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi(\vec{r}, t)$$

$$J_j = -D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_i}$$

Liniowa elastyczność

$$F = -kx$$

$$\sigma = C \varepsilon$$



W przypadku modelowania odkształceń plastycznych zmiennymi pola będą naprężenia i prędkości odkształcenia, czyli modelem konstytutywnym będzie na przykład prawo plastycznego płynięcia Levy-Misesa

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{3} \frac{\sigma_p}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_i} \boldsymbol{\varepsilon}$$



Równanie konstytutywne

stanowi relacje pomiędzy dwiema wielkościami fizycznymi charakterystycznymi dla danego materiału lub substancji, mają charakter fenomenologiczny lub wyprowadzane są z zasad pierwszych.

Model Konstytutywny

Model Reologiczny



Rheology (z Greki)

rheo, *płynięcie*

ology, *studia nad*

Reologia jest nauką o deformacji i płynięciu.

Ciekawiej można powiedzieć:

Reologia jest nauką o płynięciu materiałów, które zachowują się w interesujący i niespotykany sposób.

W tym rozumieniu modelem reologicznym będą zależności opisujące naprężenie uplastyczniające lub lepkość materiału w funkcji zmiennych zewnętrznych (temperatura, prędkość odkształcenia, itp.) i/lub zmiennych wewnętrznych (gęstość dyslokacji, wielkość ziarna, kąt misorientacji między ziarnami, itp.)



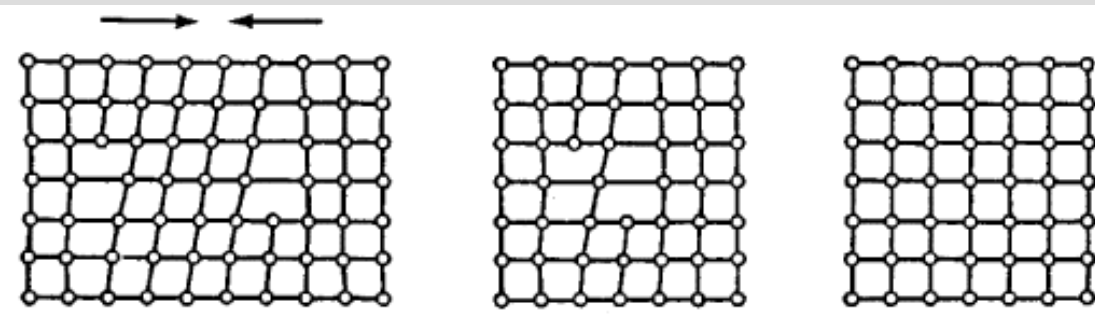
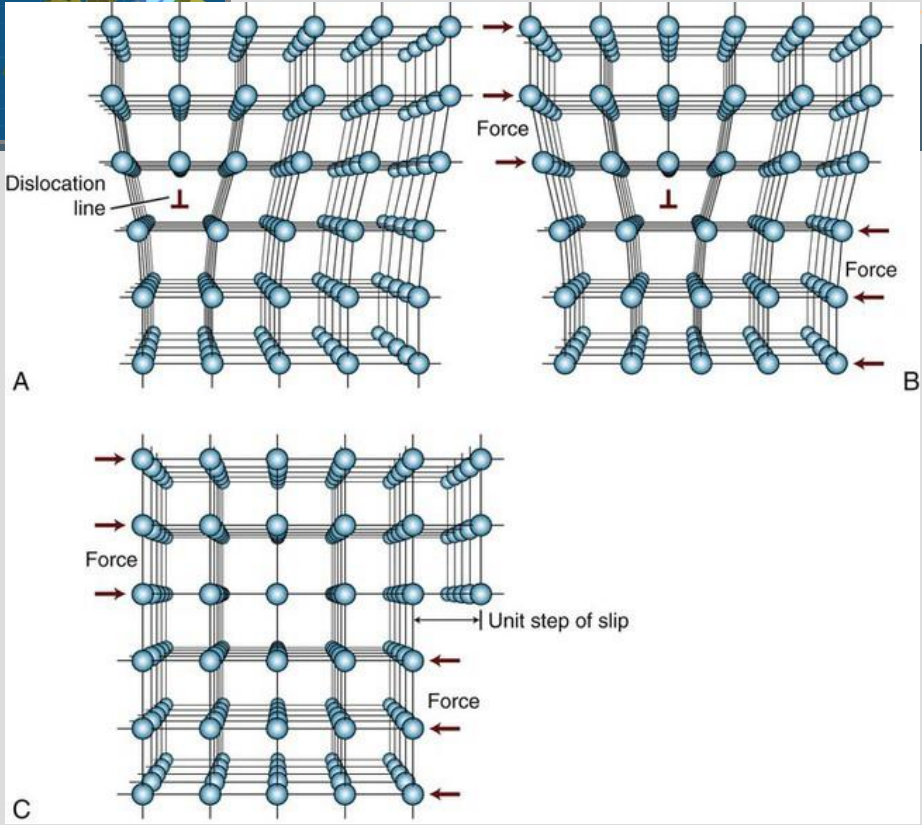
Krzywe umocnienia

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2\sigma_p}{3\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_i} \boldsymbol{\varepsilon}$$



Krzywe umocnienia



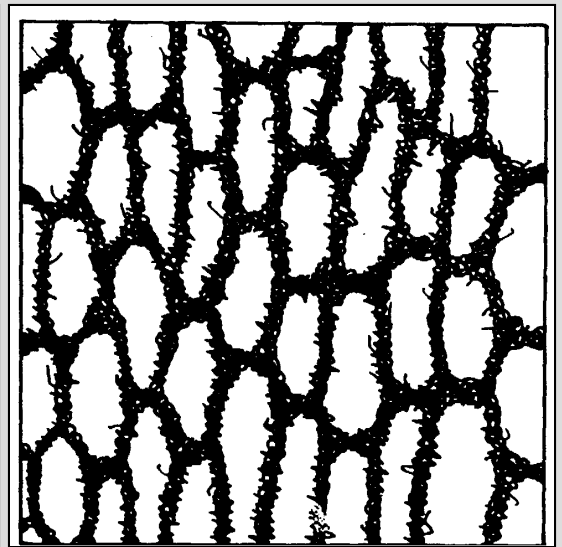
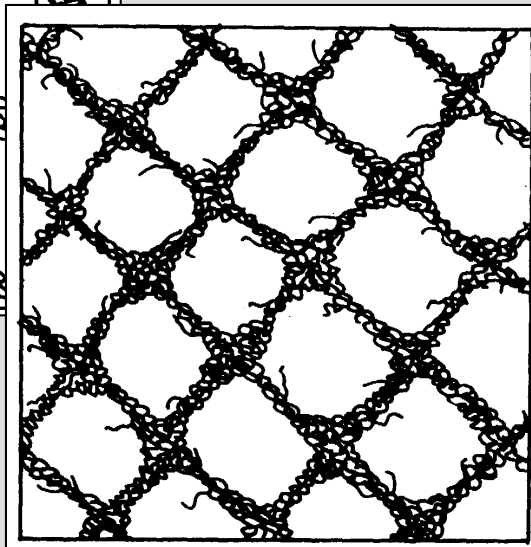
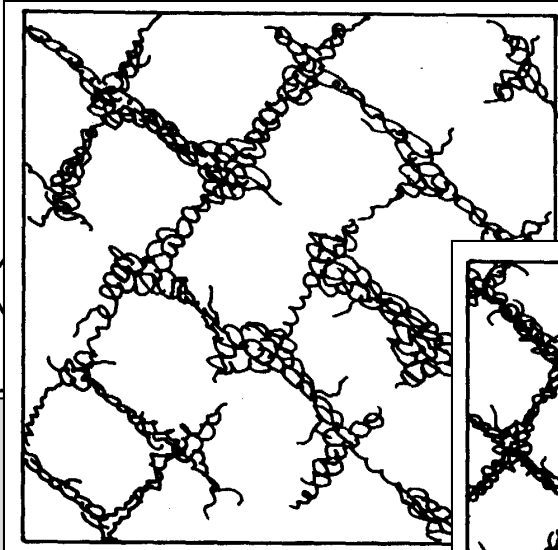
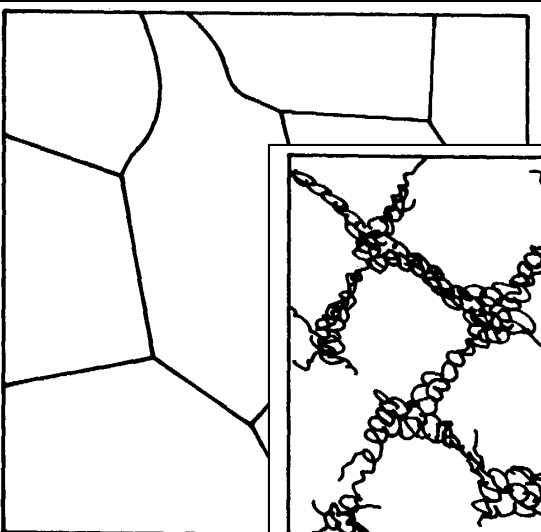




Krzywe umocnienia

- umocnienie- wzrost gęstości dyslokacji.

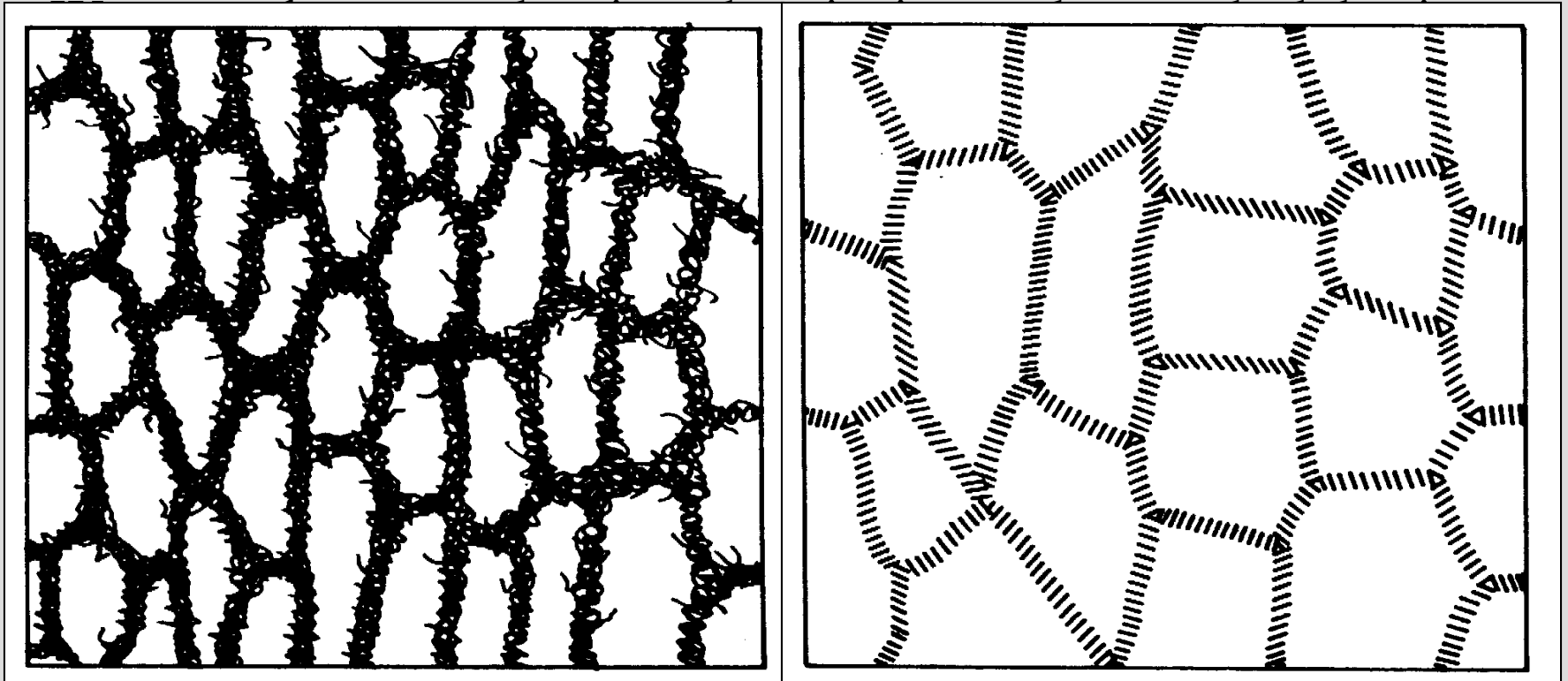
ruchu dyslokacji są granice ziaren oraz inne
działające przemieszczających się
dyslokacji prowadzi do szybkiego

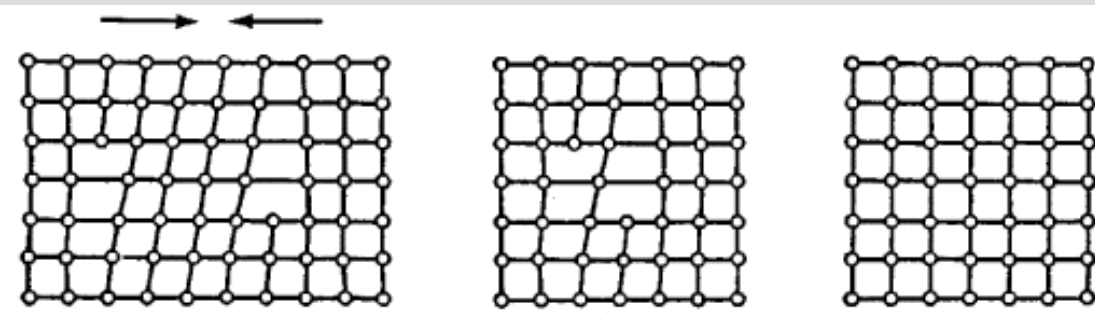
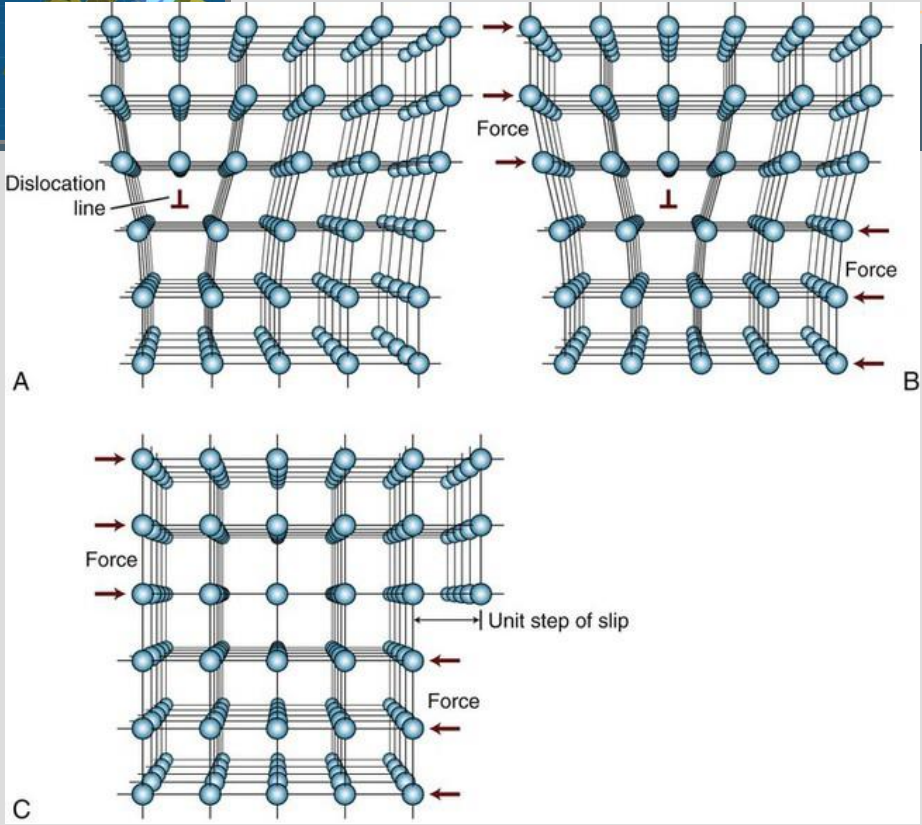




Krzywe umocnienia

- zdrowienie- spadek gęstości dyslokacji w wyniku ich anihilacji.





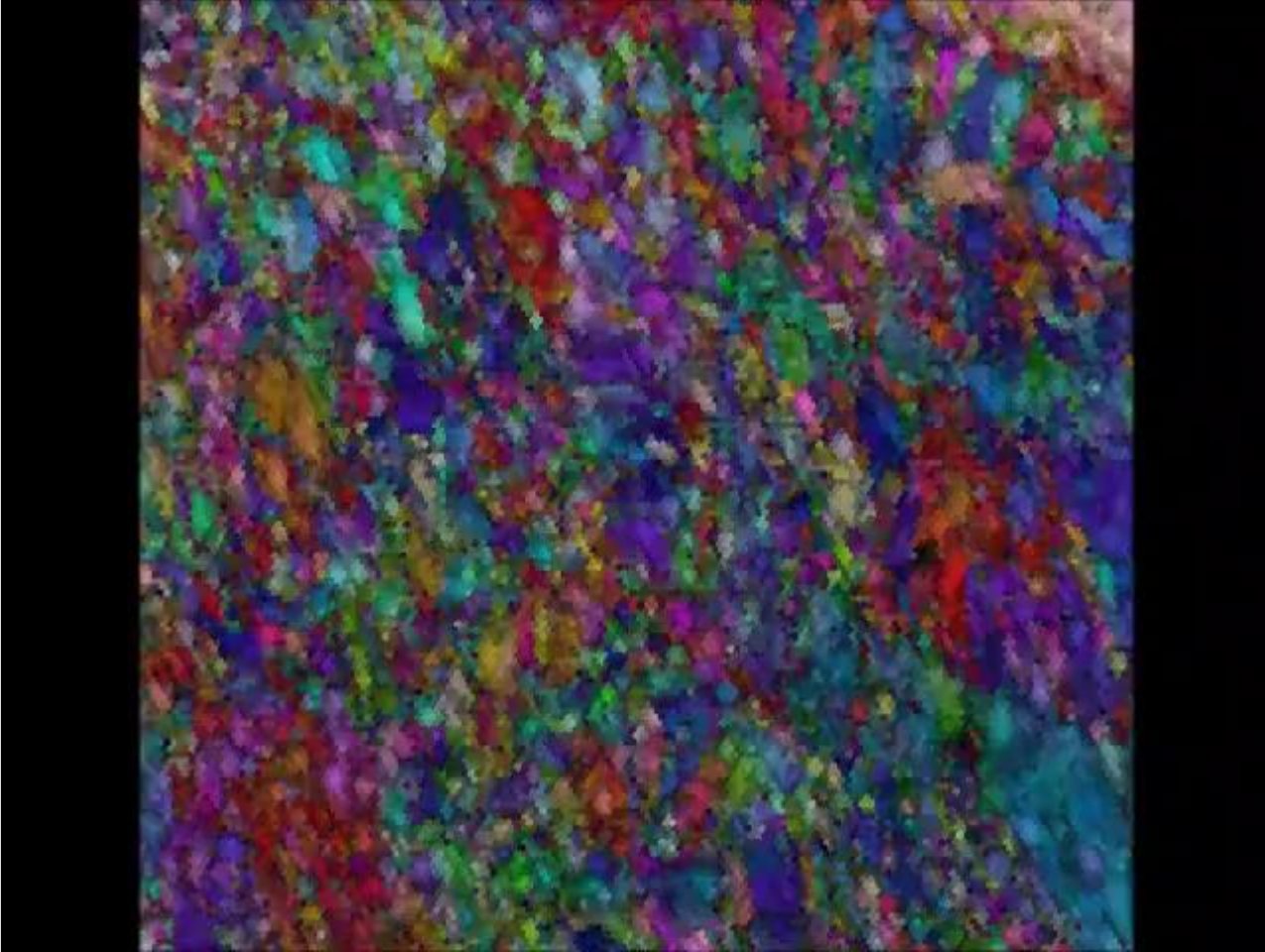


Krzywe umocnienia

• **rekrytalizacje dynamiczną**, która pojawia się po przekroczeniu pewnej krytycznej wartości gęstości dyslokacji - ρ_c

Proces ten składa się z dwóch etapów:

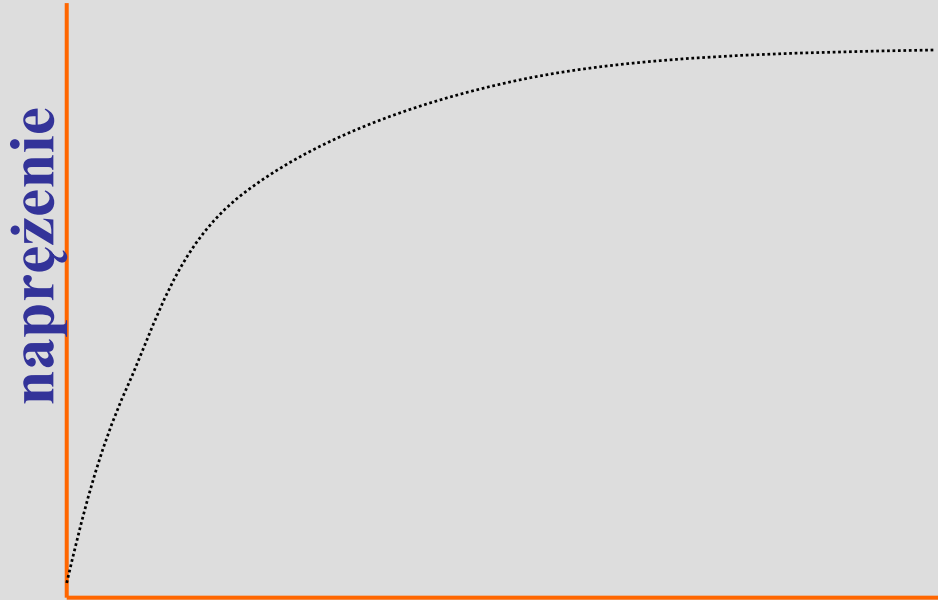
- tworzenie (zarodkowanie) ziarn
- wzrost ziarn



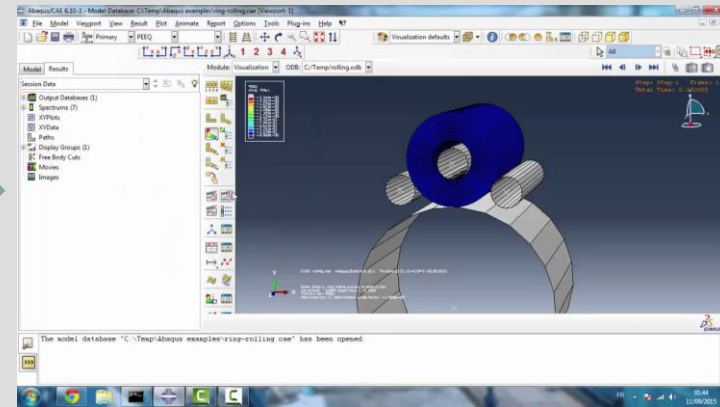
Matt Nowell, EBSD Product Manager



Krzywe umocnienia



Program symulacyjny



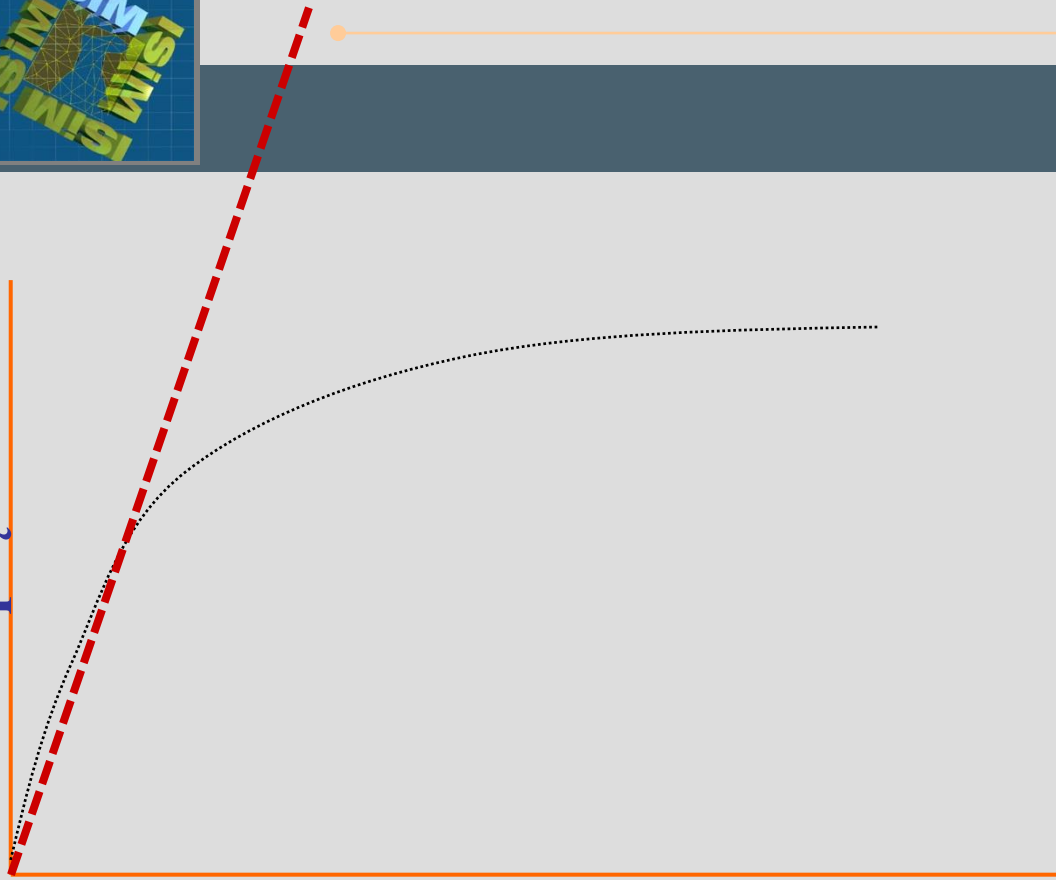
odkształcenie



Równanie



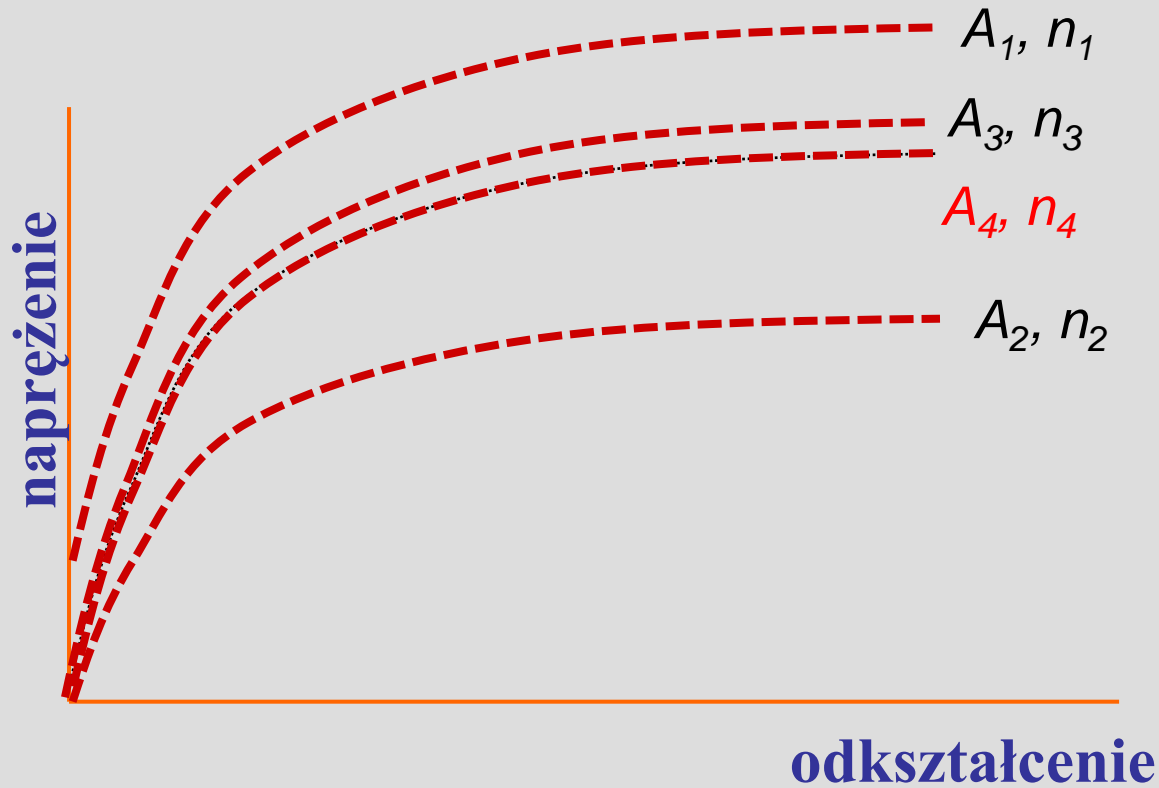
naprężenie



odkształcenie

$$\sigma = A\varepsilon$$

$$\sigma = A\varepsilon^n$$



$$\sigma = A\varepsilon^n$$

$$\sigma = A_4\varepsilon^{n_4} \rightarrow$$

Program symulacyjny



Krzywe umocnienia

Podejście konwencjonalne

$$\sigma_p = f(\varepsilon_i, \mathbf{p})$$

Naprężenie uplastyczniające jest funkcją odkształcenia ε_i oraz parametrów procesu (np. temperatury i prędkości odkształcenia) zebranych w wektorze \mathbf{p}

Zalety: stosunkowo prosta postać funkcji opisujących naprężenie uplastyczniające

Wady: nieuwzględnienie wpływu historii odkształcenia. Zmiana warunków odkształcenia powoduje natychmiastowe przejście układu na nowe równanie stanu.



Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na zimno

$$\sigma_p = f(\varepsilon_i)$$

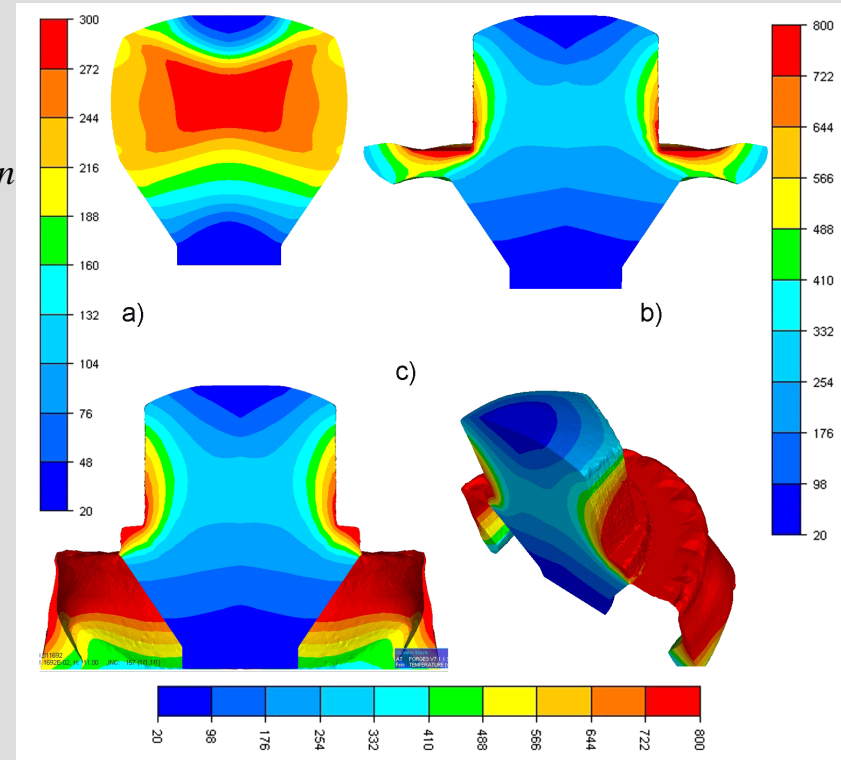
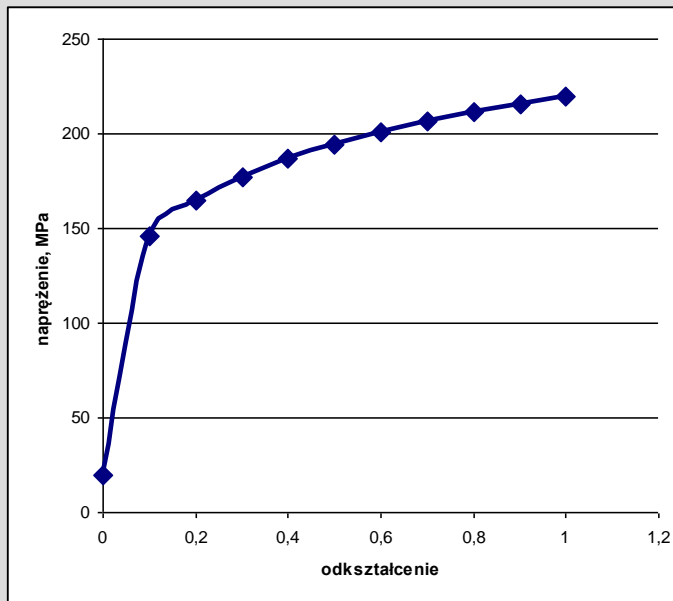
$$\sigma_p = C \varepsilon_i^n \rightarrow$$

$$\sigma_p = \sigma_0 + C \varepsilon_i^n$$

$$\sigma_p = C (\varepsilon_i + \varepsilon_0)^n$$

$$\sigma_p = \sigma_0 + C (\varepsilon_i + \varepsilon_0)^n$$

ε_i	σ_p
0	20
0,1	146,1915
0,2	164,9559
0,3	177,2006
0,4	186,5106
0,5	194,1101
0,6	200,5761
0,7	206,23
0,8	211,2705
0,9	215,8297
1	220





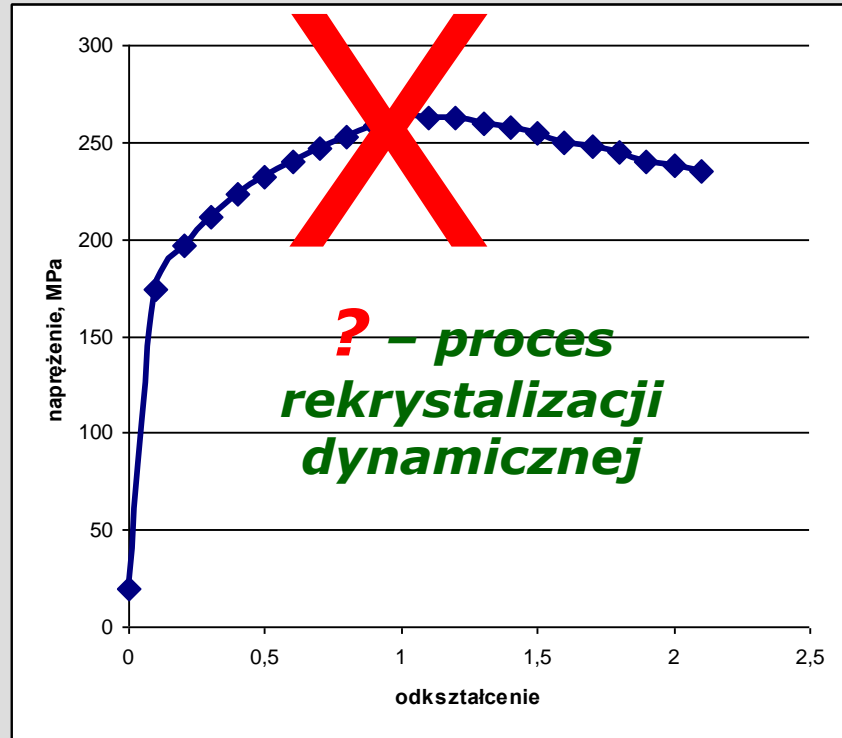
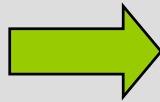
Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na zimno

$$\sigma_p = f(\varepsilon_i, \mathbf{p}) \quad \text{gdzie:} \quad \mathbf{p} = (\dot{\varepsilon}_i, T)$$

$$\sigma_p = \sigma_0 + K \varepsilon_i^n \dot{\varepsilon}_i^m \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$$

$$\sigma_p = A_0 \varepsilon_i^n \sinh^{-1}\left[\left(\frac{Z}{A_1}\right)^m\right]$$

$$Z = \dot{\varepsilon}_i \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$$





Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na gorąco

Hansel i Spittel

$$\sigma_p = A e^{m_1 T} T^{m_2} \varepsilon_i^{m_3} e^{m_4 / \varepsilon_i} (1 + \varepsilon_i)^{m_5 T} e^{m_7 \varepsilon_i} \dot{\varepsilon}_i^{m_6} \dot{\varepsilon}_i^{m_8 T}$$

Model opracowany w CEMEF

$$\sigma_p = \sqrt{3} \left[\exp(-R_0 \varepsilon_i) K_0 \varepsilon_i^n \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) + \left[1 - \exp(-R_0 \varepsilon_i)\right] K_{sat} \exp\left(\frac{\beta_{sat}}{T}\right) \right] (\sqrt{3} \dot{\varepsilon}_i)^m$$

Model opracowany w Uniwersytecie w Sheffield

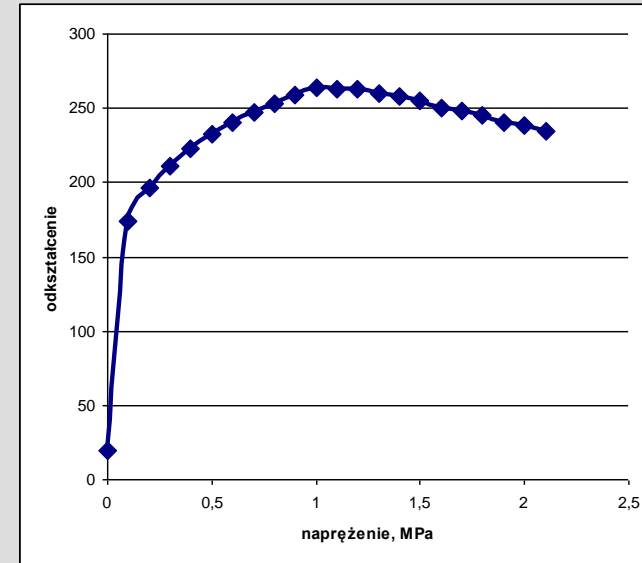
$$\sigma_p = \sigma_0 + (\sigma_{ss(e)} - \sigma_0) \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_r}\right) \right]^2 - R$$

W modelu jest 16 współczynników

$$R = \begin{cases} 0 & \varepsilon \leq \varepsilon_c \\ (\sigma_{ss(e)} - \sigma_{ss}) \left[1 - \exp\left(-\left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{\varepsilon_{xr} - \varepsilon_c}\right]^2\right) \right] & \varepsilon > \varepsilon_c \end{cases}$$

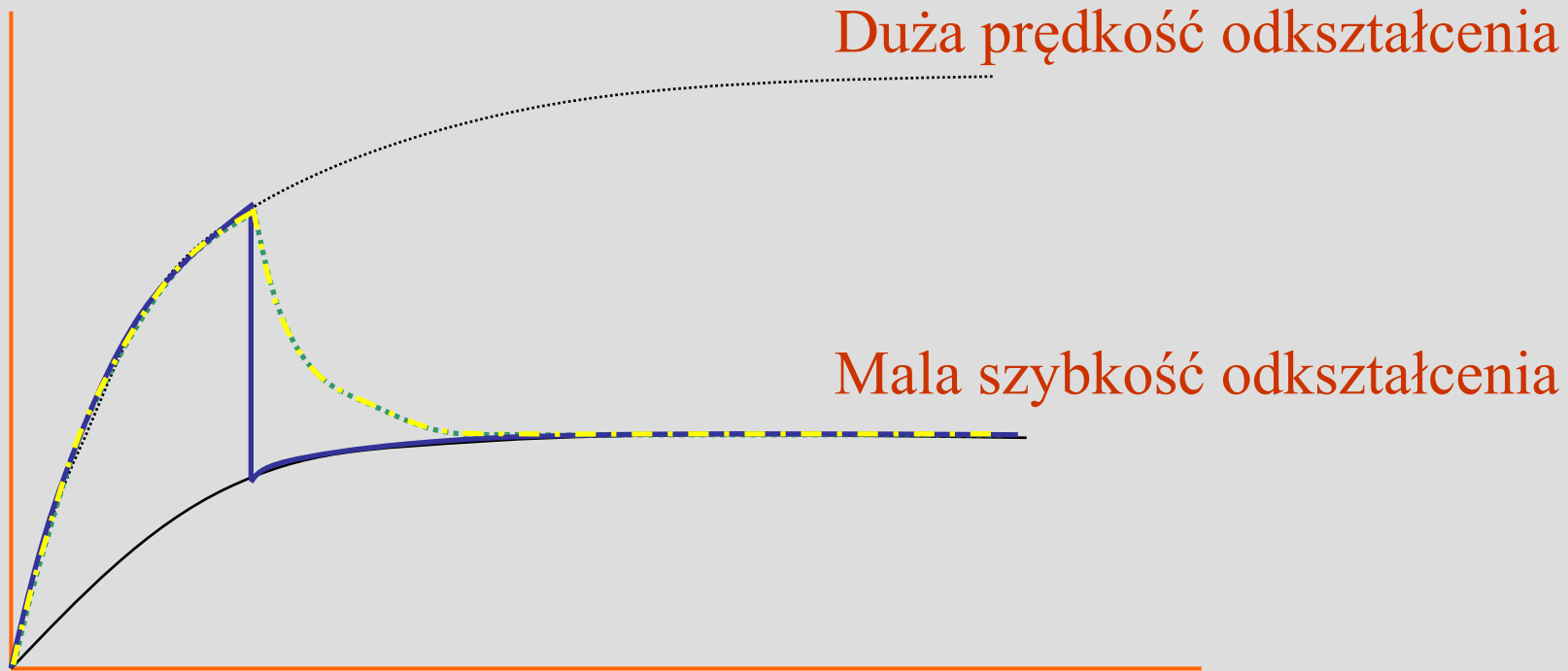
$$\sigma_0 = \frac{1}{\alpha_0} \sinh^{-1}\left(\frac{Z}{A_0}\right)^{\frac{1}{n_0}} \quad \sigma_{ss} = \frac{1}{\alpha_{ss}} \sinh^{-1}\left(\frac{Z}{A_{ss}}\right)^{\frac{1}{n_{ss}}} \quad \sigma_{sse} = \frac{1}{\alpha_{sse}} \sinh^{-1}\left(\frac{Z}{A_{sse}}\right)^{\frac{1}{n_{sse}}} \quad Z = \varepsilon \exp\left(\frac{Q_{def}}{RT_{def}}\right)$$

$$\varepsilon_r = \frac{1}{3.23} [q_1 + q_2 (\sigma_{ss(e)})^2] \quad \varepsilon_{xr} - \varepsilon_c = \frac{\varepsilon_{xs} - \varepsilon_c}{1.98} \quad \varepsilon_c = C_c \left(\frac{Z}{\sigma_{ss(e)}}\right)^{N_c} \quad \varepsilon_{xs} - \varepsilon_c = C_x \left(\frac{Z}{\sigma_{ss(e)}}\right)^{N_x}$$





Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na gorąco



Wyniki eksperymentu

Podejście konwencjonalne

Metoda zmiennych wewnętrznych



Metoda zmiennych wewnętrznych :

$$\sigma_p = f(t, \mathbf{p}, \mathbf{q})$$

Naprężenie uplastyczniające jest funkcją czasu t , zmiennych wewnętrznych zebranych w wektorze \mathbf{q} oraz parametrów procesu (np. temperatura, prędkość odkształcenia) zebranych w wektorze \mathbf{p} .

W przypadku materiałów metalicznych najczęściej stosuje się uproszczone rozwiązanie, zakładające jedną zmienną wewnętrzną, którą jest średnia wartość gęstości dyslokacji ρ .



Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na gorąco

Równanie różniczkowe, które opisuje zmiany gęstości dyslokacji w czasie odkształcenia ma postać:

$$\frac{d\rho}{dt} = A - B\rho - C\rho R(\rho - \rho_c)$$

Funkcja $R(\rho - \rho_c)$ jest zdefiniowana jako:

$$R(\rho - \rho_c) = \begin{cases} 0 & \text{dla } \rho \leq \rho_c \\ \rho - \rho_c & \text{dla } \rho > \rho_c \end{cases}$$

$$A = \frac{\dot{\varepsilon}_i}{bl}$$

l - średnia swobodna droga dyslokacji

b - wektor Burgersa

D - rozmiar ziarna

v - stała

τ - energia na jednostkę długości linii dyslokacji

m - mobilność (ruchliwość) granic ziarn

Q_s - energia aktywacji dla samodyfuzji

M_0 - współczynnik samodyfuzji

γ - część granicy ziarna, która ulega przemieszczeniu

$$B = \frac{\dot{\varepsilon}_i M_0}{D} \exp\left(\frac{Q_s}{RT}\right)$$

$$C = \frac{v\gamma}{D} m\tau$$



Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na gorąco

Funkcja dystrybucji gęstości dyslokacji

$$\frac{dG(\rho, t)}{dt} = \phi(d\varepsilon) - g(\varepsilon) - \frac{v\gamma}{D} m\tau\rho G(\rho, t)$$

$$\phi(\Delta\varepsilon) = \frac{\dot{\varepsilon}}{bl}$$

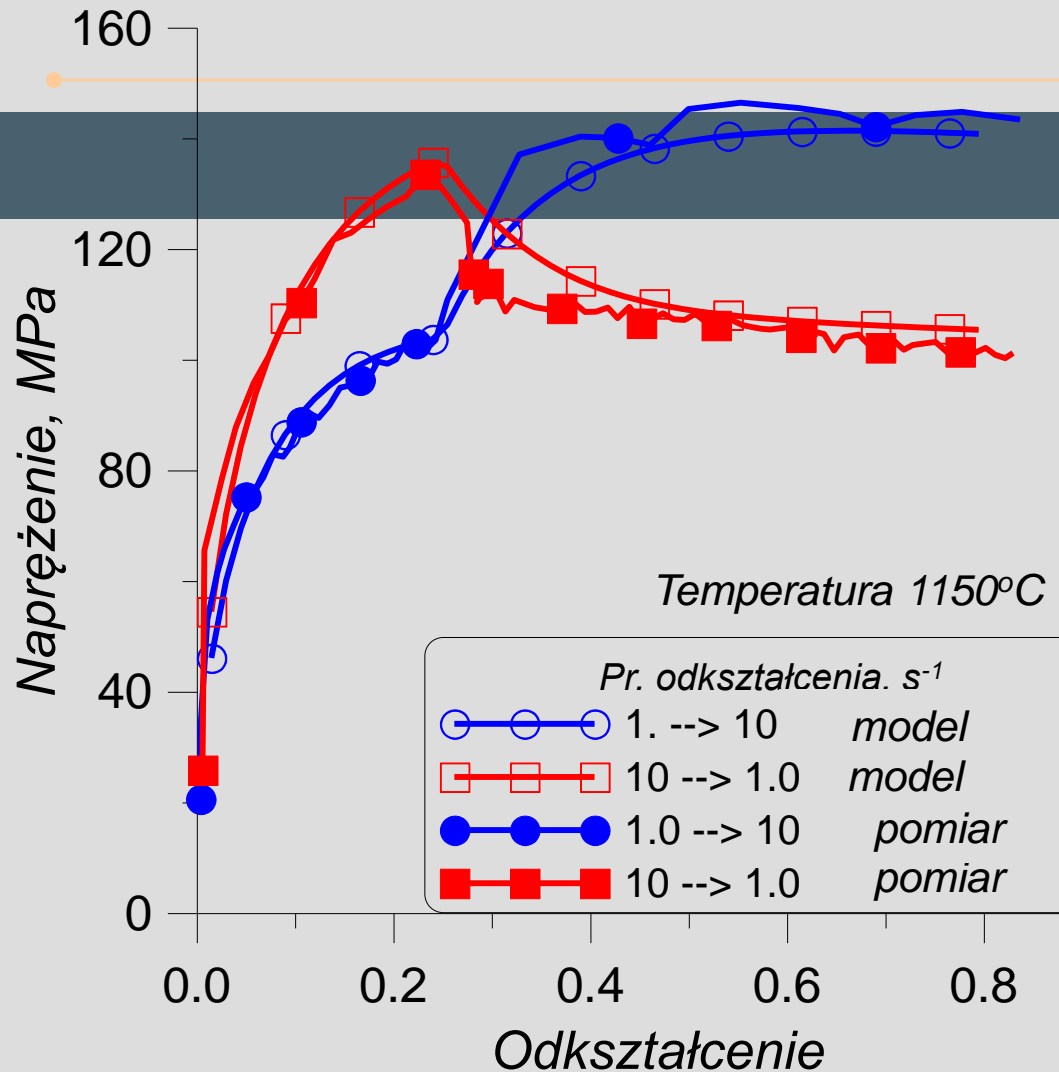
$$m = m_0 \exp\left(\frac{-Q_m}{RT}\right)$$

$$\gamma = (0.1 + X)^{q_1} (1 - X) \left(\frac{\rho}{\rho_{cr}}\right)^{q_2}$$

$$g(\varepsilon) = M_d \rho$$

$$\tau = \frac{\mu b^2}{2}$$

$$\rho_{cr} = \left(\dot{\varepsilon} \frac{16\sigma_g}{3bml\tau^2}\right)^{\frac{1}{3}} \quad l = d = \frac{K_d}{Z^q}$$



Zalety: możliwość uwzględnienia wpływu historii odkształcenia

Wady: skomplikowane funkcje opisujące napężenie, powoduje to wydłużenie czasu obliczeń w programach opartych na MES

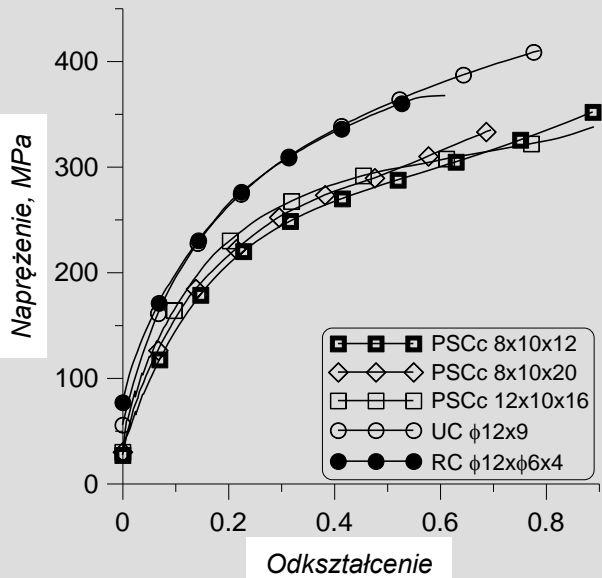


Krzywe umocnienia do symulacji procesów plastycznej przeróbki na gorąco

Bliźniakowanie

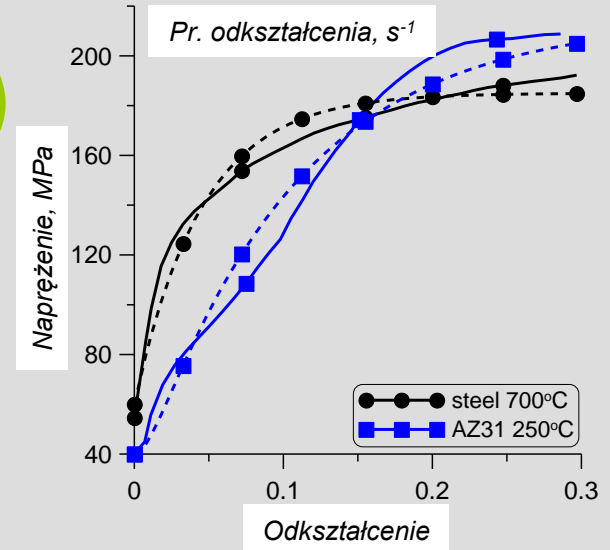
$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{\dot{\varepsilon}}{bl} - M\rho(t) - \frac{Sc}{bl} \frac{d^2\rho(t)}{dt^2}$$

Wpływ mikro pasm i pasm ścinania



$$\sigma_p = \frac{\sigma_{pf}}{\zeta}$$

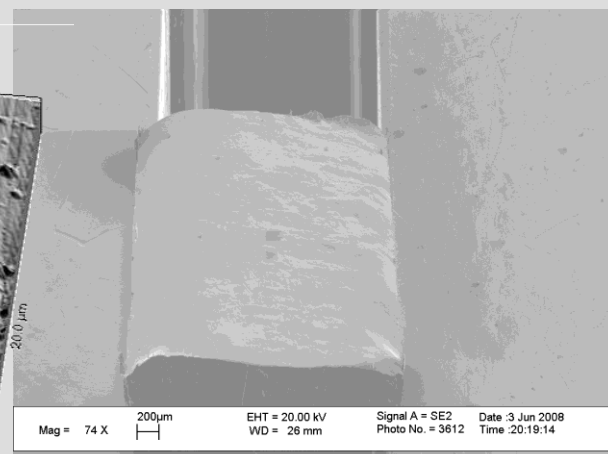
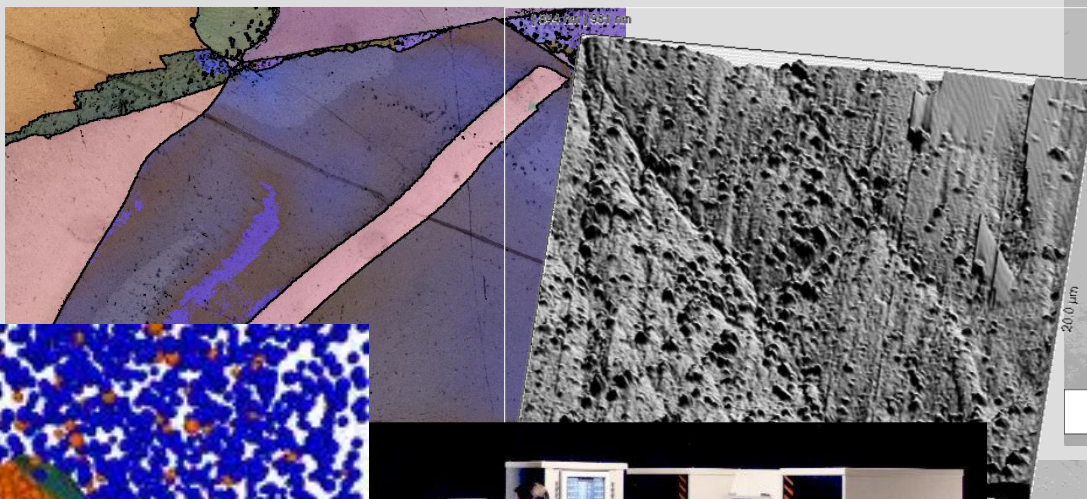
$$\zeta = 1.25 + \frac{1}{2\pi} \arctan(10\chi)$$



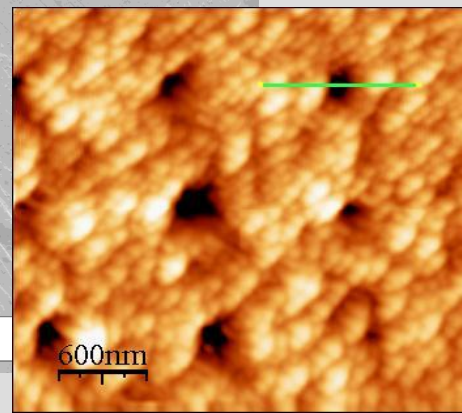
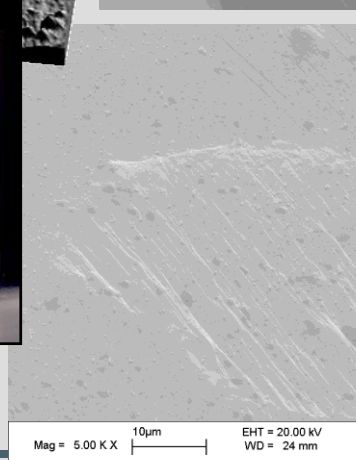
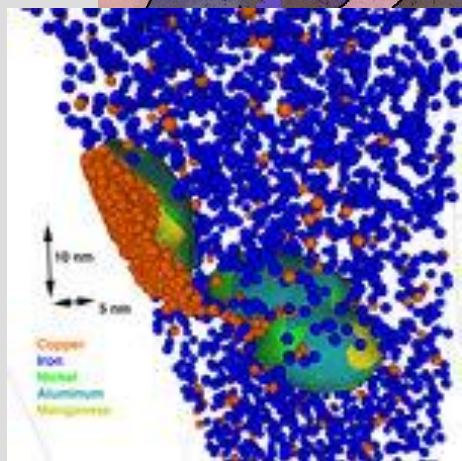




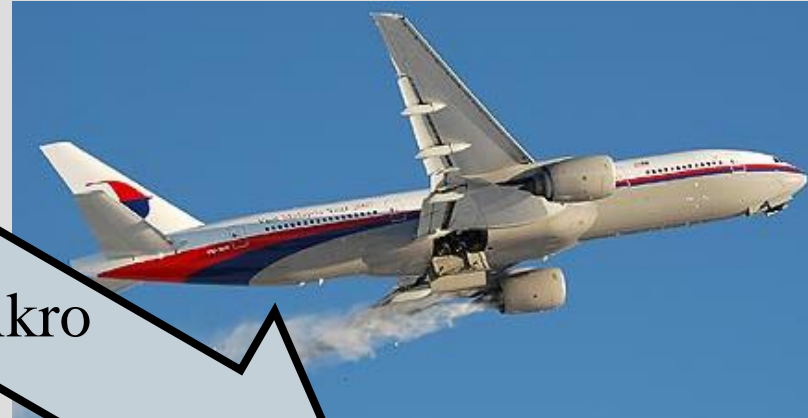
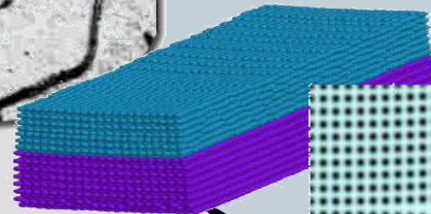
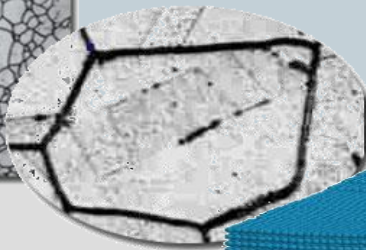
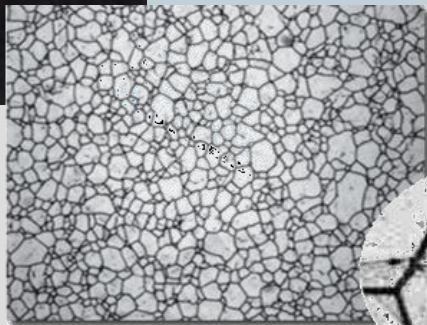
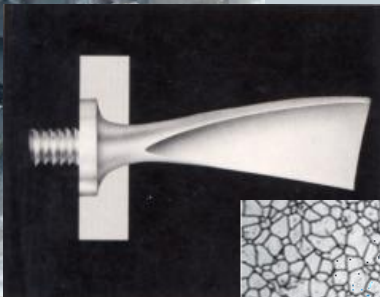
Dynamiczny rozwój w technikach badawczych (SEM, TEM, AFM, in-situ, thomografia, itp.). NOWE SPOJRZENIE NA MATERIAŁ



Nanoindentation



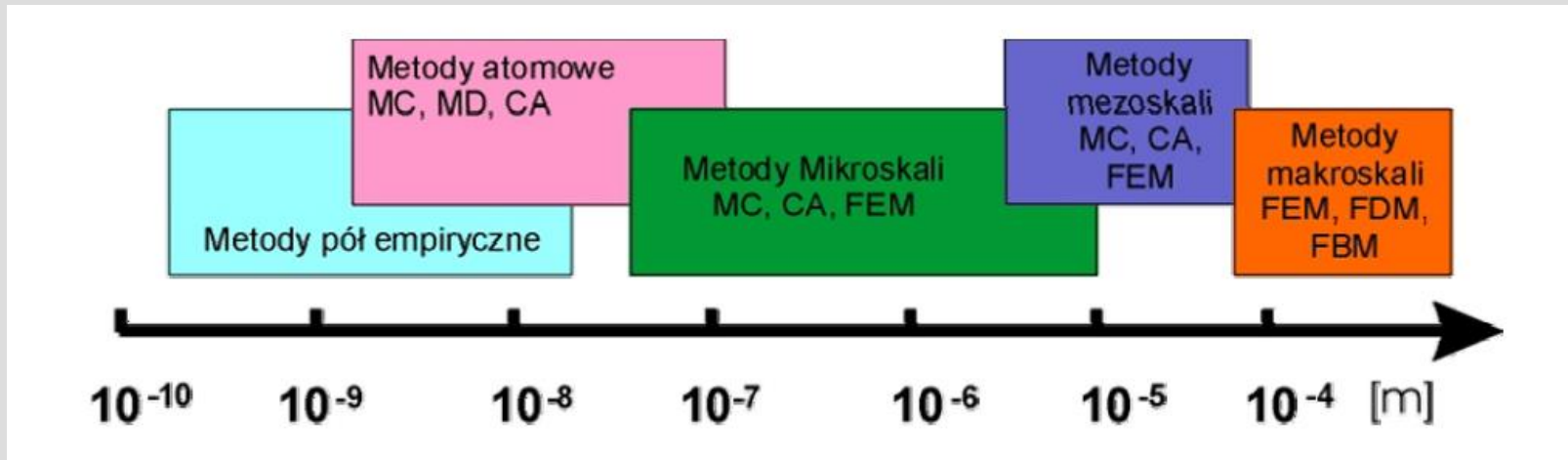
SEM – scanning electron microscopy – skaningowy mikroskop elektronowy
TEM – transmission electron microscopy – transmisyjny mikroskop elektronowy
AFM – atomic force microscope – mikroskop sił atomowych



makro

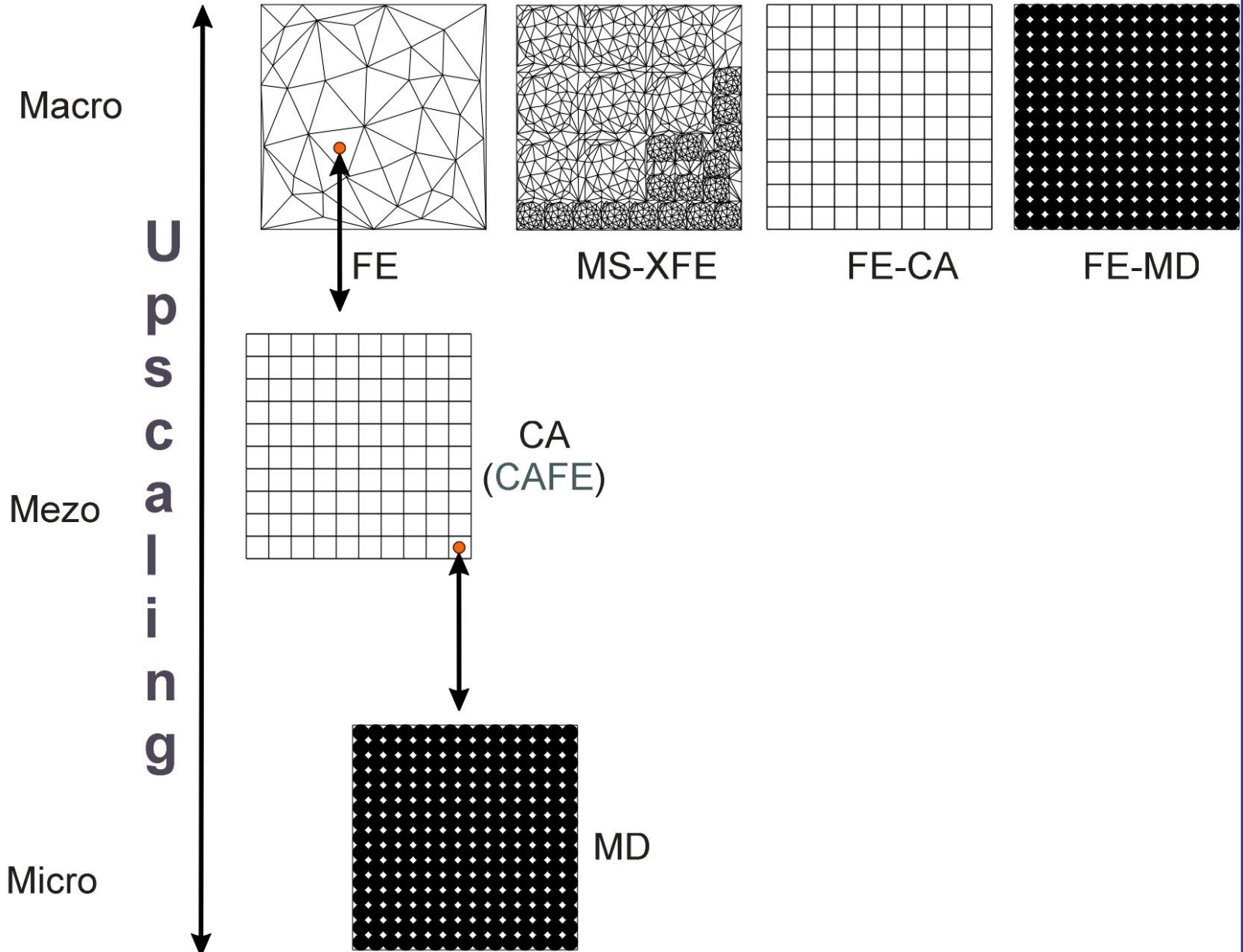
mikro

nano



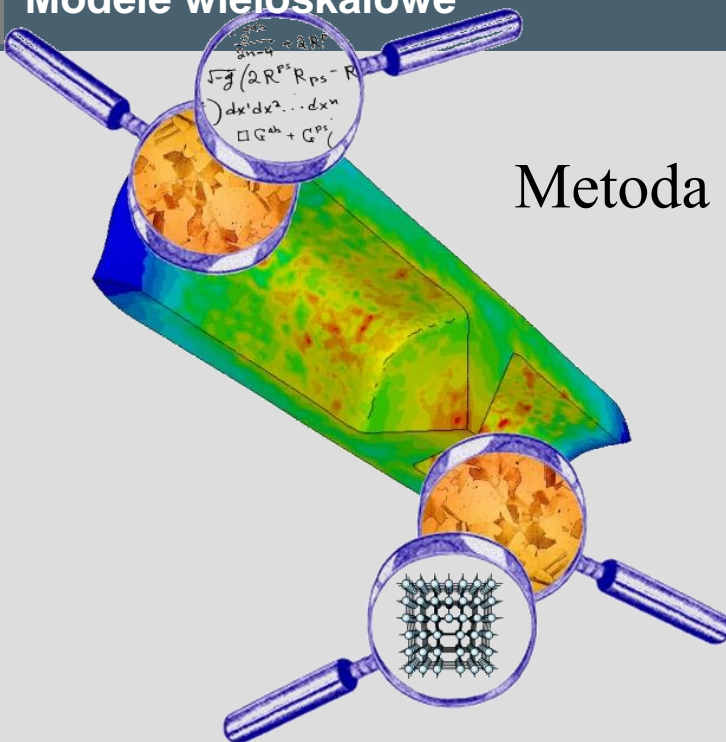
Spośród wielu metod przeznaczonych do analizy zjawisk w różnych skalach można wyróżnić np. metodę Automatów Komórkowych, metodę Monte Carlo czy metody Dynamiki Molekularnej.

Concurrent





Modele wieloskalowe

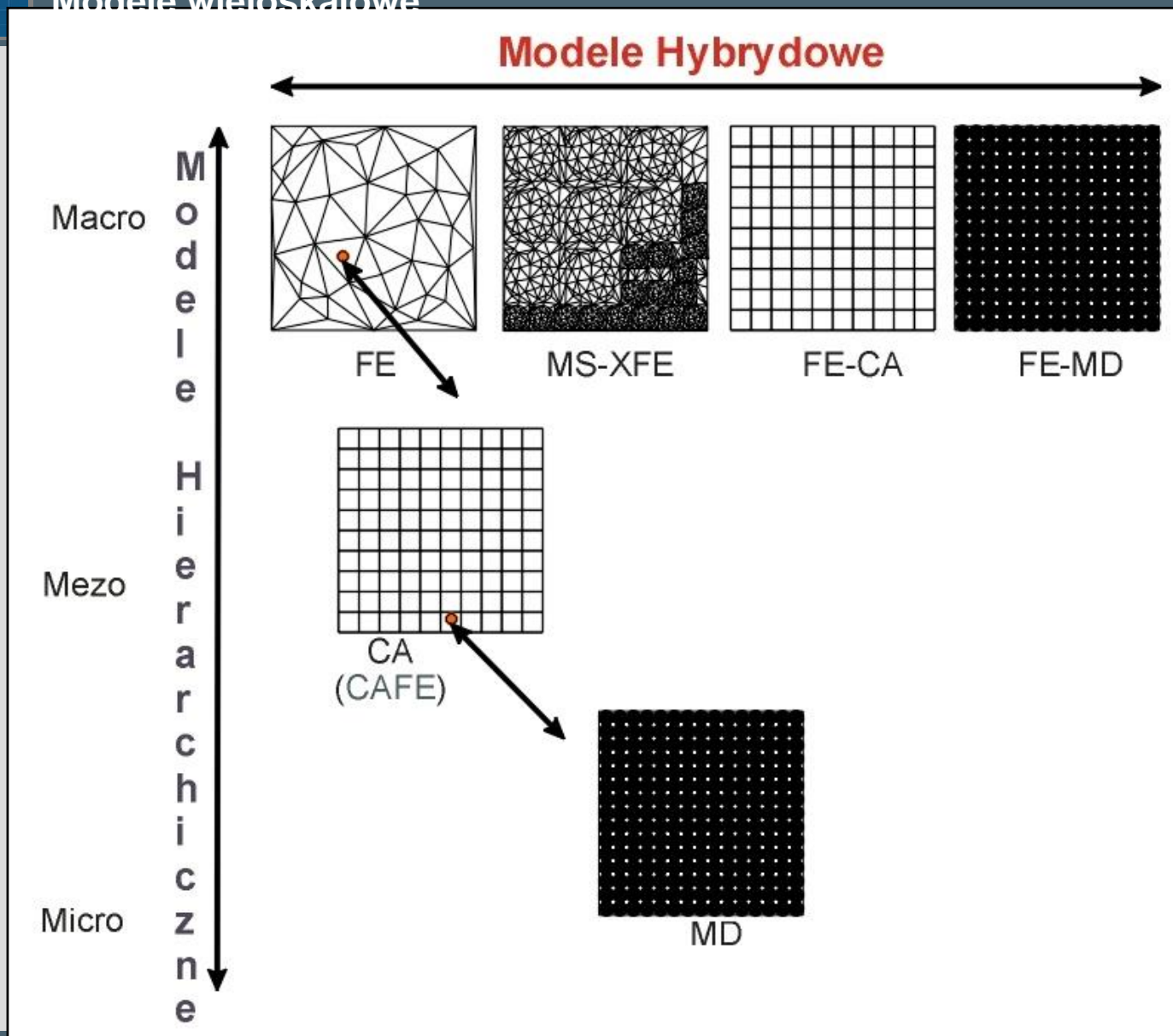


Metoda Elementów Skończonych

Metody analizy mikro

Konwencjonalne
Równania różniczkowe

Alternatywne
Metody dyskretne – CA, MD





Metody analizy wieloskalowej można podzielić na dwie podstawowe grupy różniące się założeniami do modelowania w różnych skalach wymiarowych oraz do uwzględnienia sposobu interakcji między nimi – metody hierarchiczne i hybrydowe (współbieżne).

Do pierwszej grupy zaliczane są metody bazujące na wybranym reprezentatywnym elemencie objętości REO (ang. RVE – Representative Volume Element).

Metoda zakłada wydzielenie z każdej skali wymiarowej reprezentacyjnego elementu objętości spełniającego warunek: rozmiar REO musi być większy od skali zjawiska, które ma modelować, i równocześnie dużo mniejszy od skali, z której został wydzielony.

Rozwiązywanie poszczególnych problemów w kolejnych skalach prowadzi do osiągnięcia makroskopowych parametrów niezbędnych do rozwiązania problemu w skali makro. Sposób taki nazwano hierarchicznym (ang. upscaling).

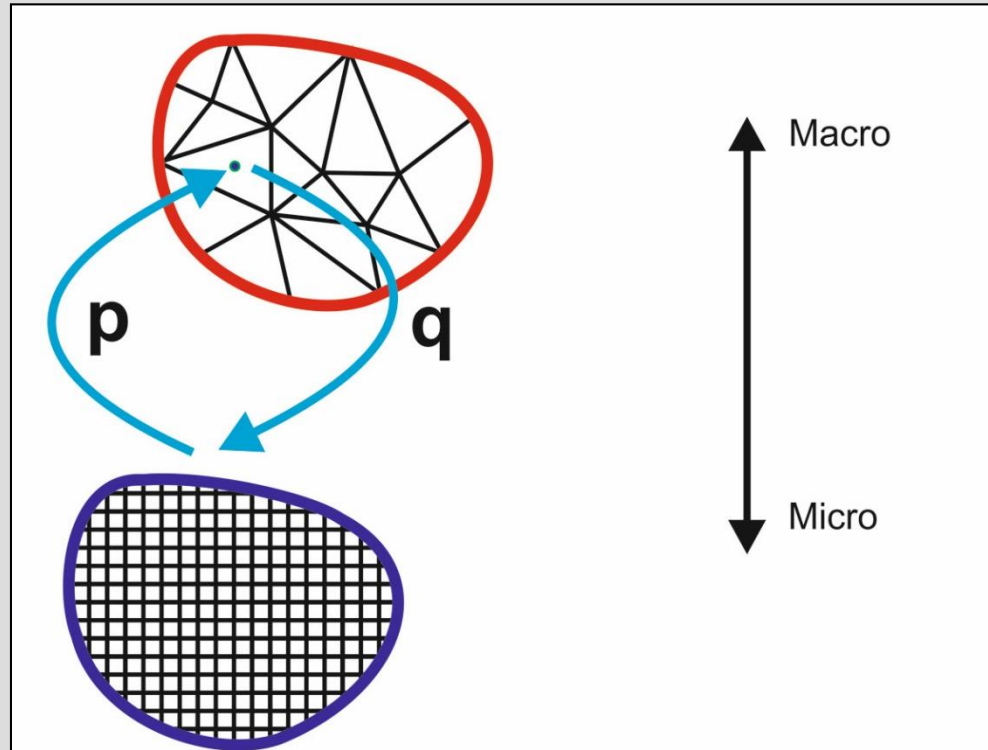




W tym przypadku można wydzielić trzy podgrupy modeli różniących się sposobem przekazywania danych pomiędzy kolejnymi skalami:

- Pierwszą podgrupę stanowią modele niesprężone typu dół-góra (ang. bottom-up), w których informacje obliczone w niższych skalach wymiarowych np. mikro stanowią podstawę tworzenia równania konstytutywnego opisującego zachowanie się materiału w skalach mezo- czy makroskopowych
- Analogiczną grupę stanowią podejścia niesprężone typu góra-dół (ang. top-down). W tym przypadku informacje ze skali makro stanowią dane wejściowe do niższych skali wymiarowych.
- Najbardziej zaawansowaną podgrupę modeli hierarchicznych stanowią modele o charakterze modeli sprzężonych, w których informacja ze skali makro wykorzystywana jest w niższych skalach wymiarowych, ale równocześnie wynik obliczeń w niższych skalach będzie wykorzystany do obliczeń w skali makroskopowej w kolejnym kroku obliczeniowym.





$$\mathbf{p} = [\sigma, \varepsilon, u, T, \dots] \quad \mathbf{q} = [\sigma_p, D, \alpha, \gamma, \dots]$$



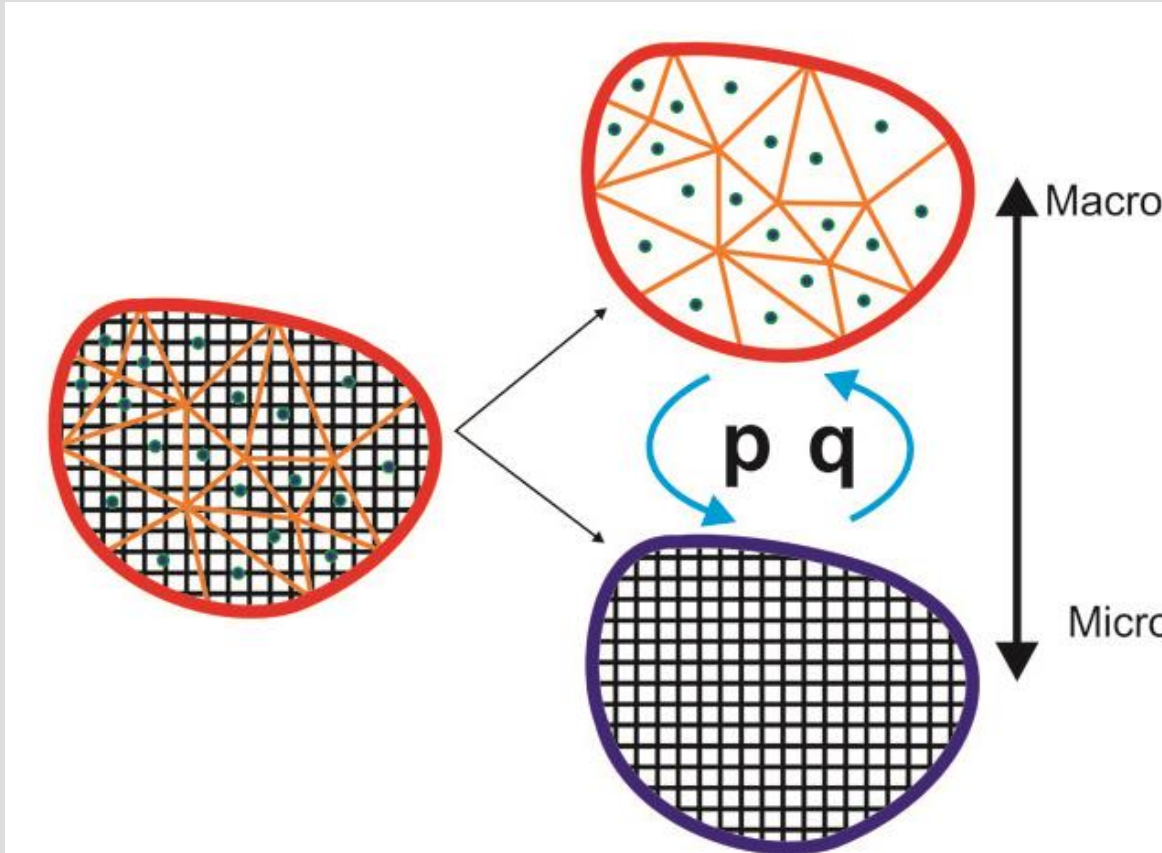
Grupa modeli hybrydowych to metody opisujące dany mechanizm/zjawisko w kilku skalach w całej lub w części objętości badanego materiału – domena obliczeniowa jest równocześnie opisana różną dyskretyzacją.

W tym przypadku prowadzenie obliczeń różnymi metodami przebiega współbieżnie w przeciwieństwie do metod hierarchicznych, gdzie obliczenia prowadzone są w reprezentacyjnych elementach objętości. Można wyróżnić metody współbieżne niesprężone typu top-down jak również modele w pełni sprężone.

Podjęcia bottom-up nie są w tym przypadku spotykane.

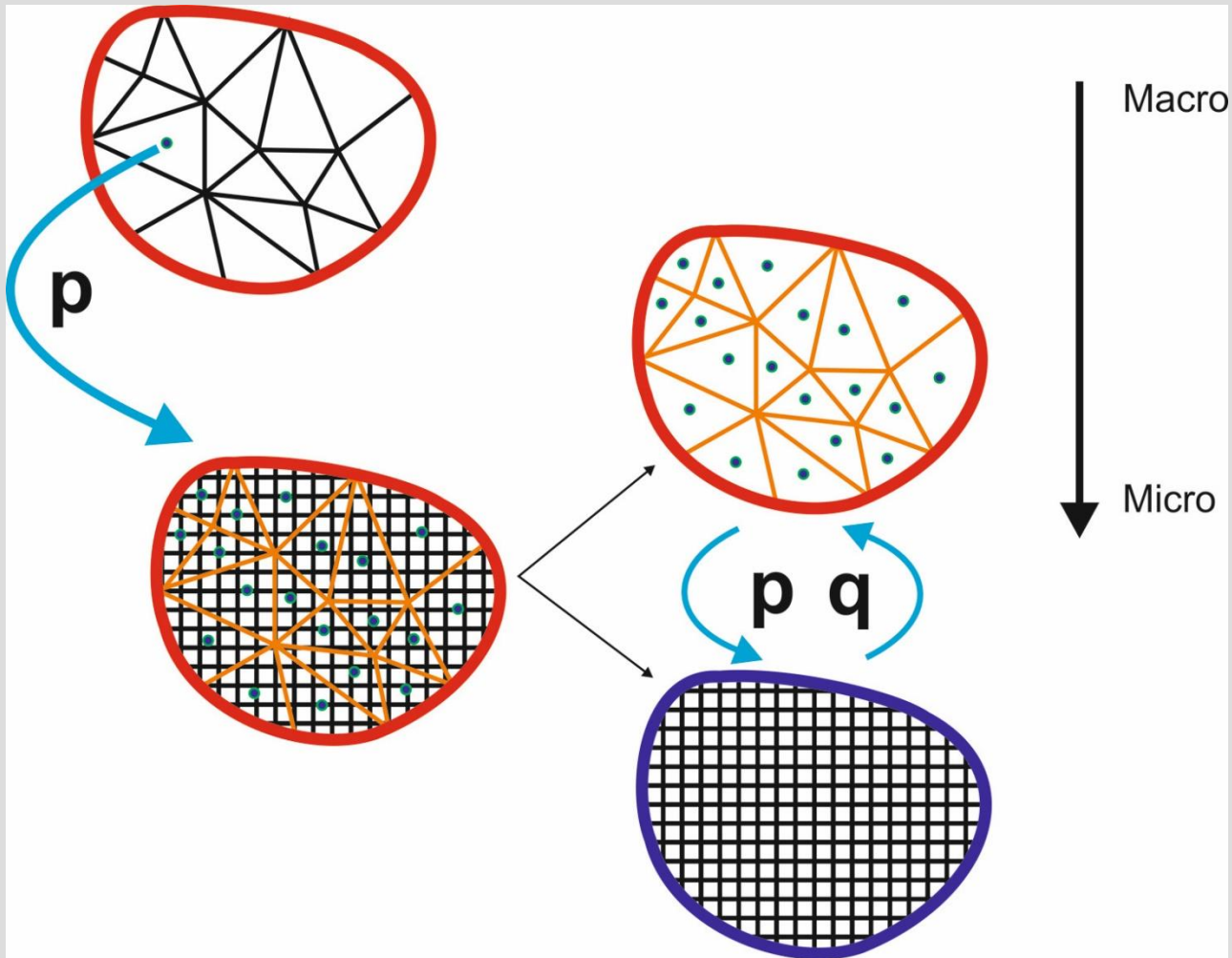
Metody analizy wieloskalowej o charakterze hybrydowym oraz hierarchicznym mogą bazować na połączeniu dwóch różnych metod obliczeniowych np. FE – MD ale również na wykorzystaniu tej samej metody do opisu zjawiska w dwóch różnych skalach np. FE – FE (tzw. FE2). Przykłady opracowania i wykorzystania metod wieloskalowych typu hierarchicznego i hybrydowego przedstawiono w kolejnym rozdziale.







Hybrid Upscaling and Concurrent model





• **Podjęcie hierarchiczne**

- Model konstytutywny w wyższej skali jest konstruowany na podstawie obserwacji w niższej skali.
- Homogenizacja jest metodą zaliczaną do tej klasy.

• **Podjęcie współbieżne**

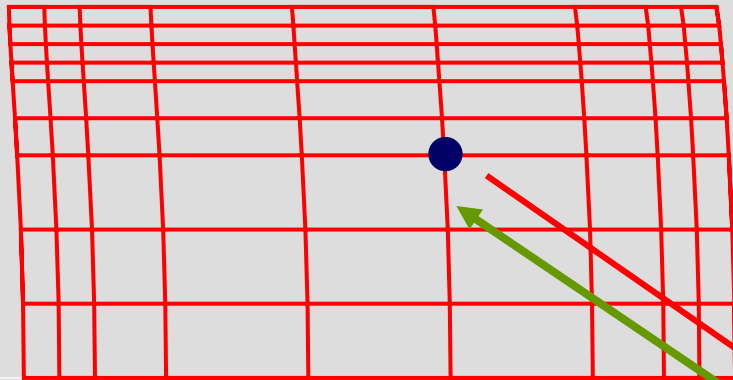
- Problem jest rozwiązywany w różnych skalach równocześnie (najczęściej w dwóch skalach) poprzez a priori dekompozycję domeny.
- Dekompozycja jest robiona na skalę zgrubną i dokładną. W praktyce metod komputerowych, problem dużej skali jest rozwiązywany, przy czym dane lokalne (np. przemieszczenia) są warunkami brzegowymi dla bardziej szczegółowej części rozwiązania.

• **Rys historyczny**

- Obydwa podejścia były, w sposób intuicyjny, od lat stosowane przez badaczy. Obecnie obserwujemy rozwój metod wieloskalowych w naukach komputerowych, które łączy modele różnych skal w sposób bardziej systematyczny.



UPSCALING - 1994



MES

Naprężenie uplastyczniające
w MES

$T, \varepsilon, \varepsilon', \sigma, \dots$

σ_p, \dots

$$\frac{dG(\rho, t)}{dt} = \phi(\rho) - g(\rho) - \frac{v\gamma}{D} m \tau \rho G(\rho, t)$$

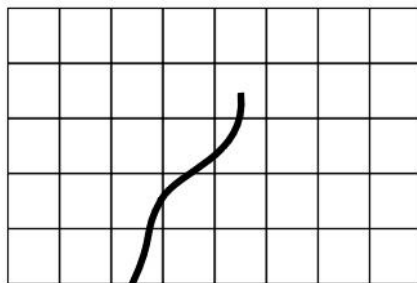
$$\sigma_p = \sigma_0 + \alpha b \mu \sqrt{\rho}$$



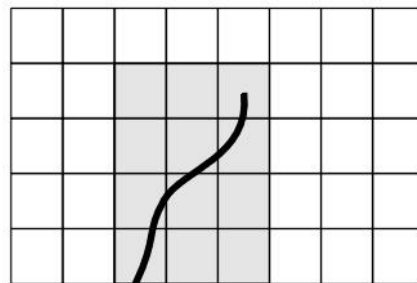
Modele wieloskala

Model Pęknięcia – X-FEM

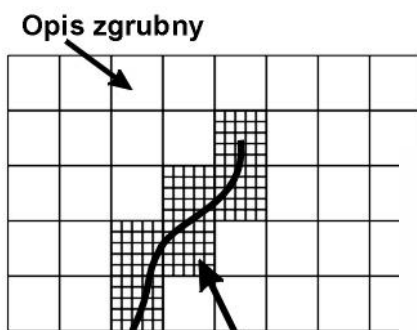
Dyskretyzacji MES w skali mikro podlega tylko obszar w okolicy pęknięcia, jest to skala dużo mniejsza niż skala makro w której opisywane jest globalne zachowanie się materiału



Zgrubna siatka MES z zaznaczonym pęknięciem

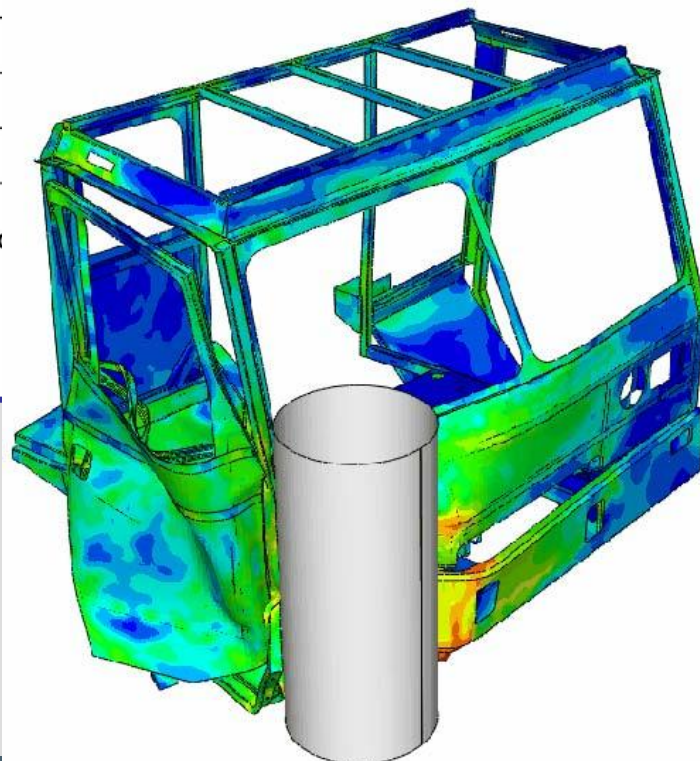
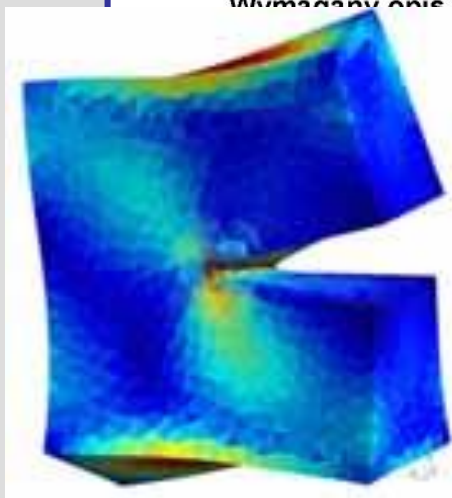
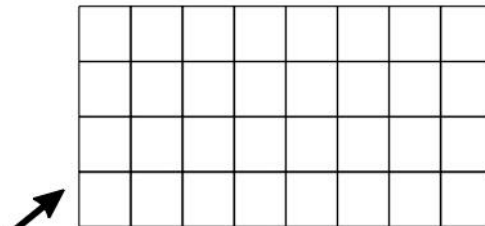


Rejon zainteresowania



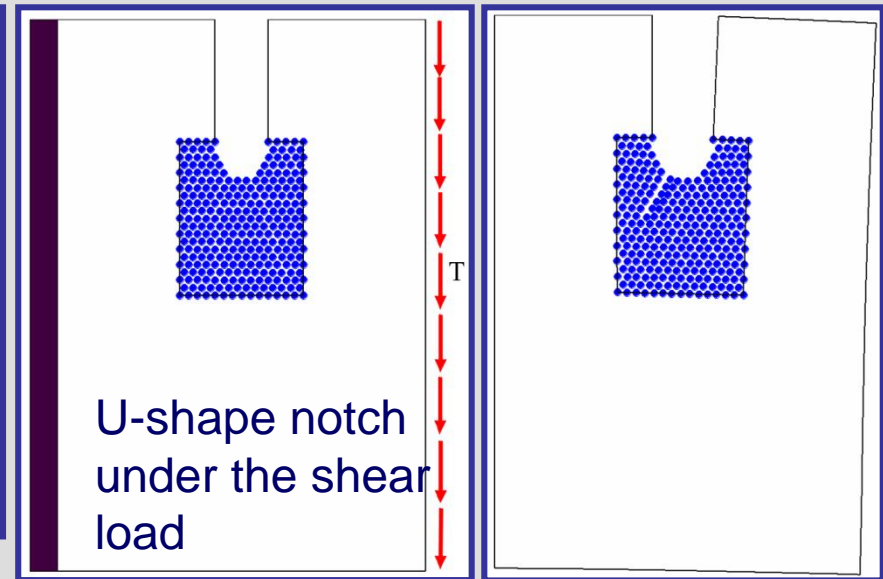
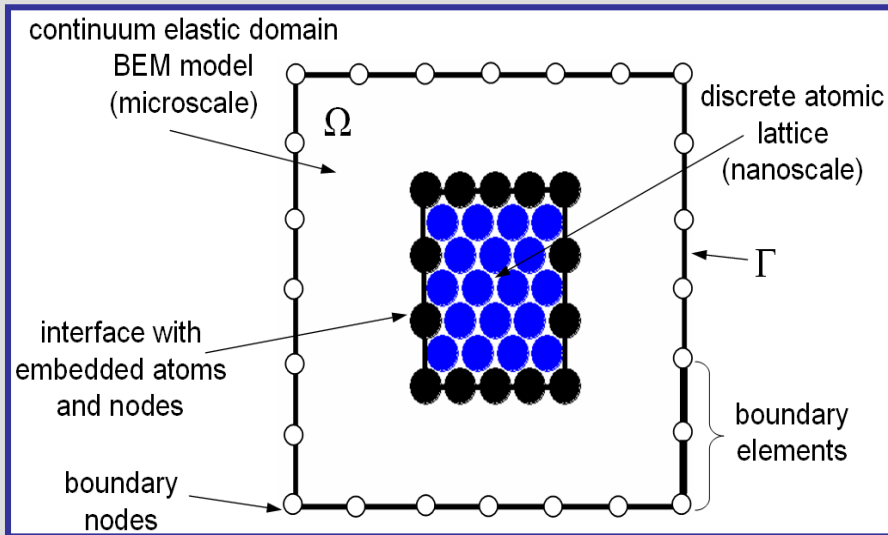
Opis zgrubny

Wymagany opis szczegół





1. BEM model jest obliczany dla zadanych warunków brzegowych
2. Przemieszczenia w płaszczyźnie granicznej są przemieszczeniami brzegu obszaru siatki atomów – warunek brzegowy Dirichleta.
3. Obliczane są nowe równowagowe położenia atomów w nanoskali
4. Siły działające na interfejs są warunkiem brzegowym Neumana dla skali makro.



Dyskretny model atomowy zastosowano do symulacji odkształcenia siatki atomów pod obciążeniem.

Symulacja propagacji pęknięć

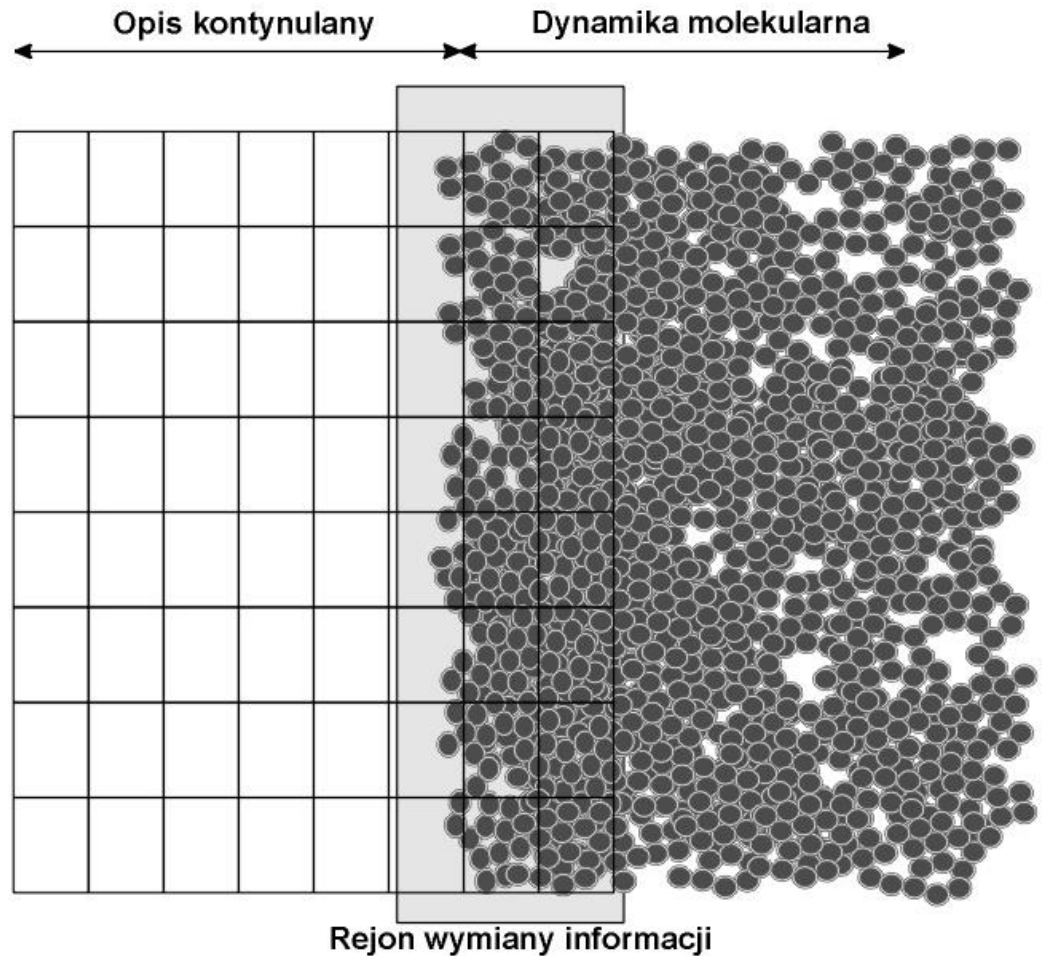


Modele wieloskalowe

Modelu do opisu ruchu płynów z uwzględnieniem ich molekularnej natury.

Metoda MD umożliwia symulację na znacznie niższym poziomie niż konwencjonalne metody aproksymacji, wymaga jednak zadania odpowiednich warunków początkowych, np. gęstości, rozkładu ciśnienia czy temperatur.

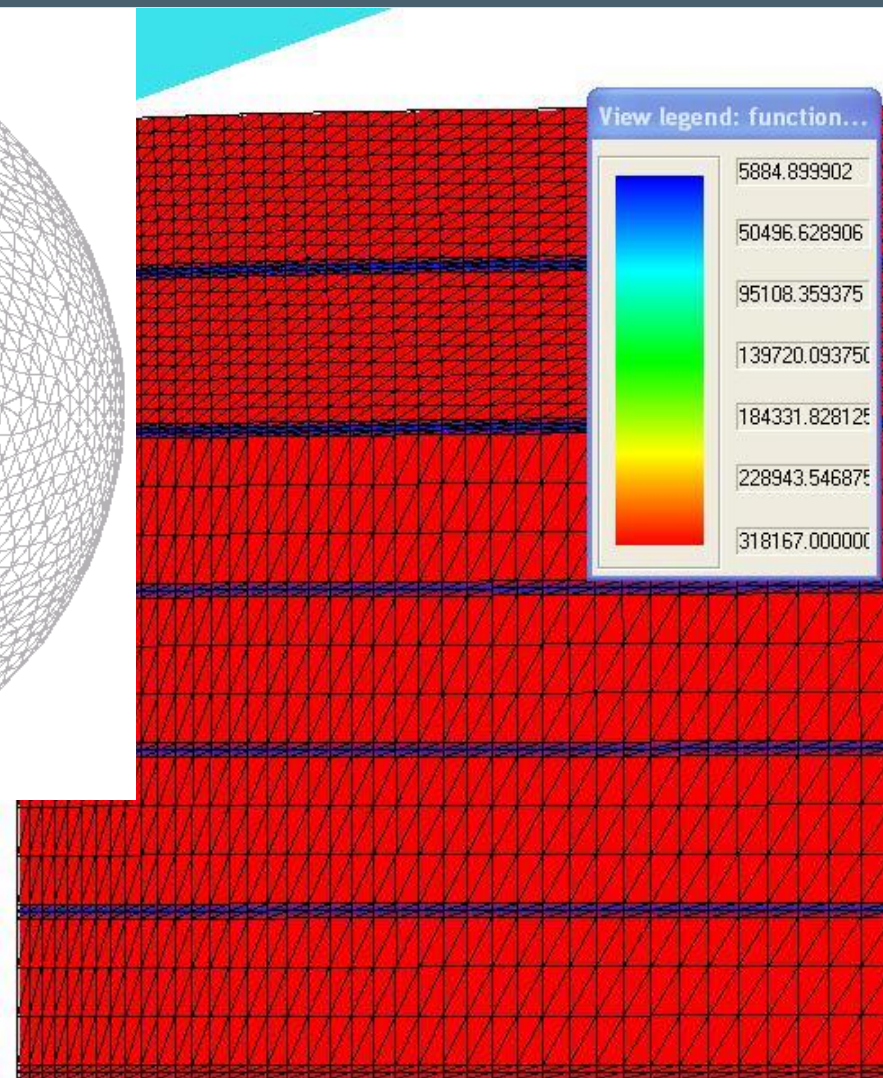
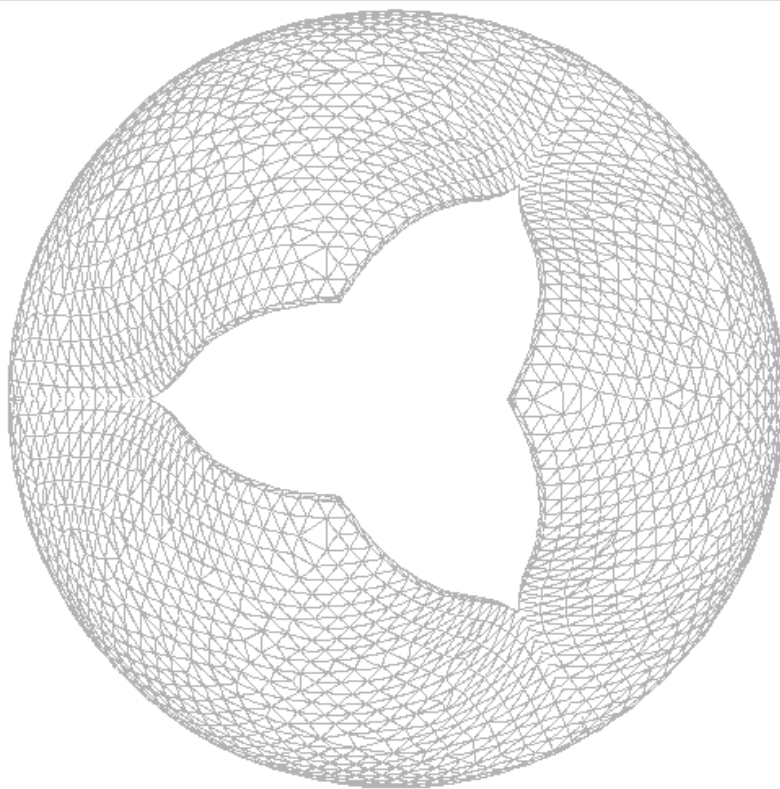
Takie dane określone są z wykorzystaniem obliczeń metodą analizy makroskopowej.





FEM - Monte Carlo

Wzrost
procesie
Vapc

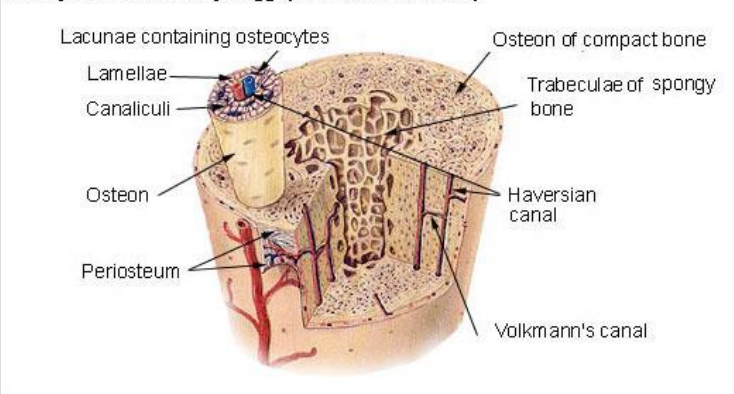


Wyniki obliczeń MES są traktowane jak
które wyznaczają rzeczywisty kształt ciele
wyniku CVD.



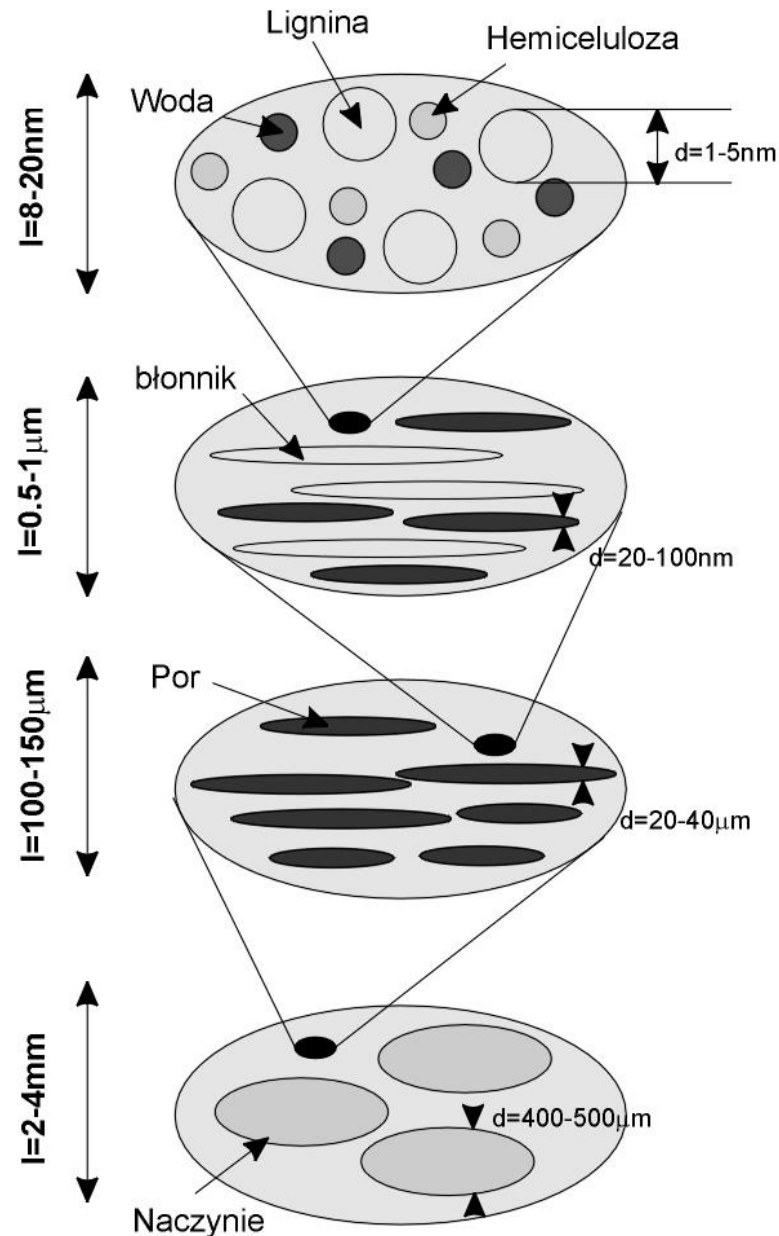
UPSCALING FEM- RVE

Compact Bone & Spongy (Cancellous Bone)



Metoda opiera się na dekompozycji na kilka skal wymiarowych wykorzystując ideę (RVE).

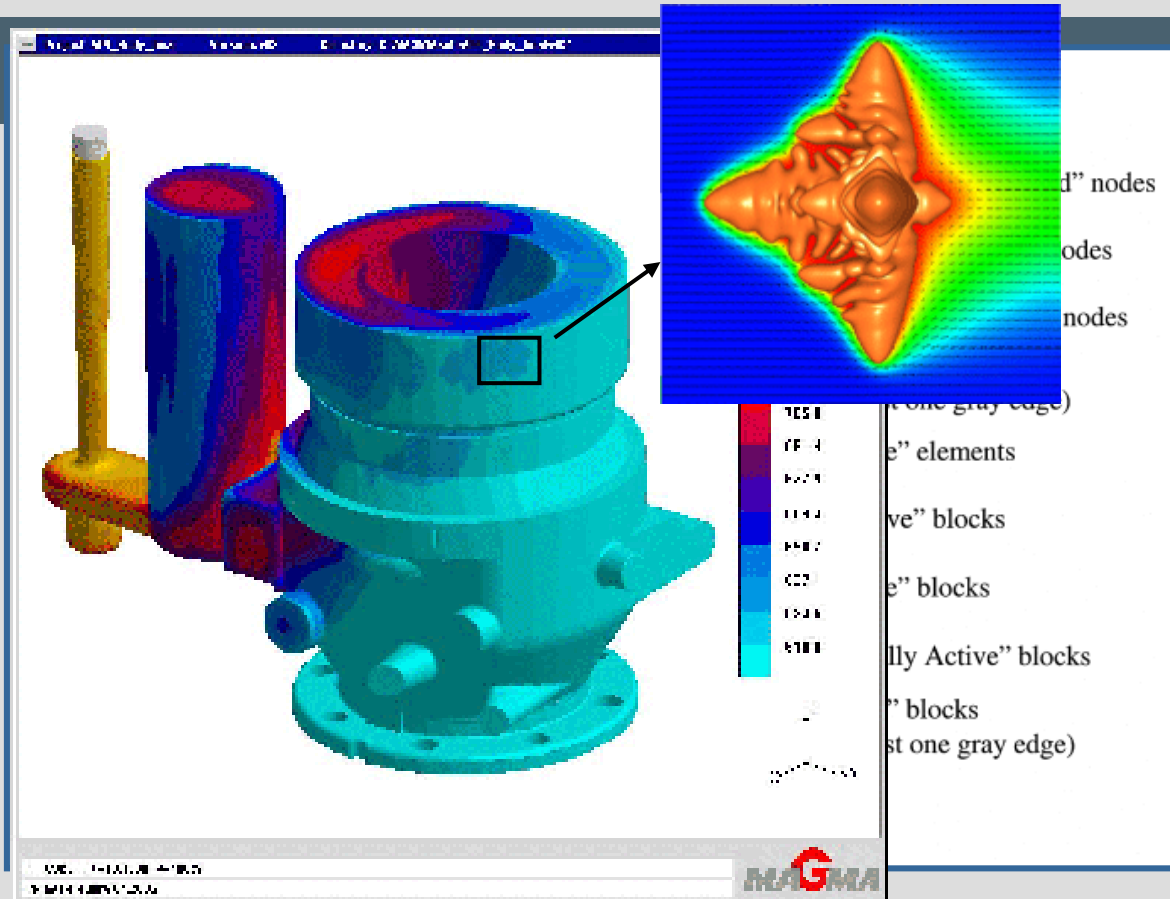
RVE jest wybierany z danej skali wymiarowej zgodnie z zasadą: „wymiar RVE jest większy niż skala wybranego problemu oraz mniejszy niż obszar, z którego został wyodrębniony”



Hellmich C., Hofstetter K., Kober C., *Computation Methods in Applied Sciences*, 6, 2006, 319-338.



Rozwój struktur dendrytycznych w procesie krzepnięcia



Gandin, C. A., Rappaz, M., Acta Metall., 42, 1994, 2233–2246.

- Różniczkowe równania opisujące pole temperatury są rozwiązywane modelem MES.
- Metoda CA jest stosowana do przewidywania rozwoju mikrostruktury i generowania ciepła w wyniku krzepnięcia.
- Obszar próbki jest pokryty przez dwie oddzielne metody: MES i CA



Wybór modelu materiału

$$\sigma_p = f(\varepsilon_i)$$

$$\sigma_p = f(\varepsilon_i, \mathbf{p})$$

$$\sigma_p = f(t, \mathbf{p}, \mathbf{q})$$

$$\sigma_p \leftarrow \frac{\text{model}}{\text{wieloskalowy}}$$

Identyfikacja parametrów modelu

$$\sigma_p = \sigma_0 + C(\varepsilon_i + \varepsilon_0)^n$$

$$\sigma_p = \sigma_0 + K \varepsilon_i^n \varepsilon_i^m \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$$

$$\sigma_p = A e^{m_1 T} \varepsilon_i^{m_2} e^{m_3 / \varepsilon_i} (1 + \varepsilon_i)^{m_4 T} e^{m_5 \varepsilon_i} \varepsilon_i^{m_6} \varepsilon_i^{m_7 T}$$

Analiza odwrotna