



Modelowanie Wieloskalowe

Automaty Komórkowe w Inżynierii Materiałowej

Prof. dr hab. inż. **Łukasz Madej**
Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania
Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

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





Modele konwencjonalne:

$$\sigma_p = f(\varepsilon)$$

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

Modele zmiennych wewnętrznych

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

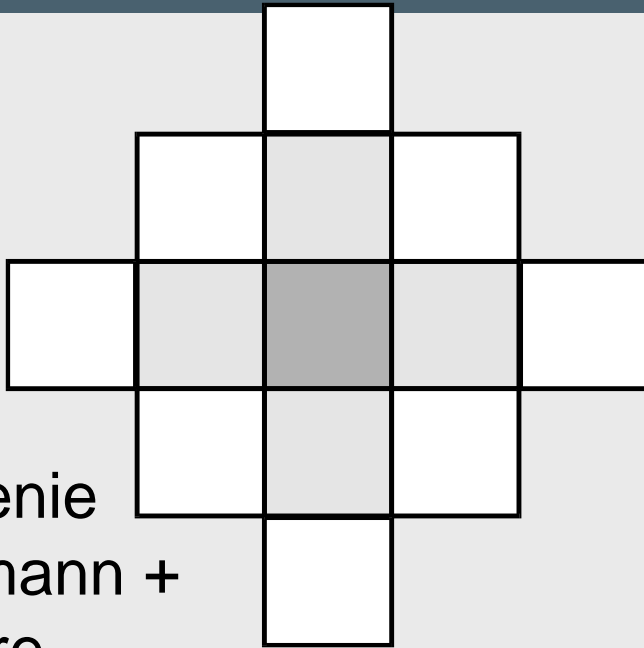
$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{3} \frac{\sigma_p}{\varepsilon_i} \boldsymbol{\varepsilon}$$

Modele oparte na metodach dyskretnych





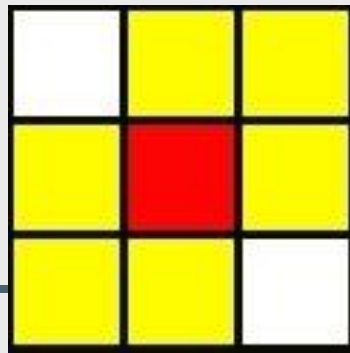
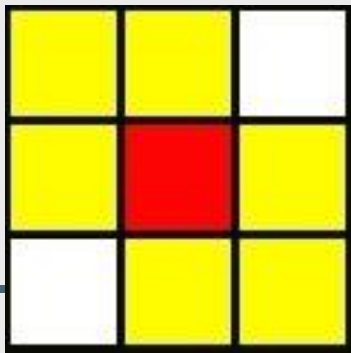
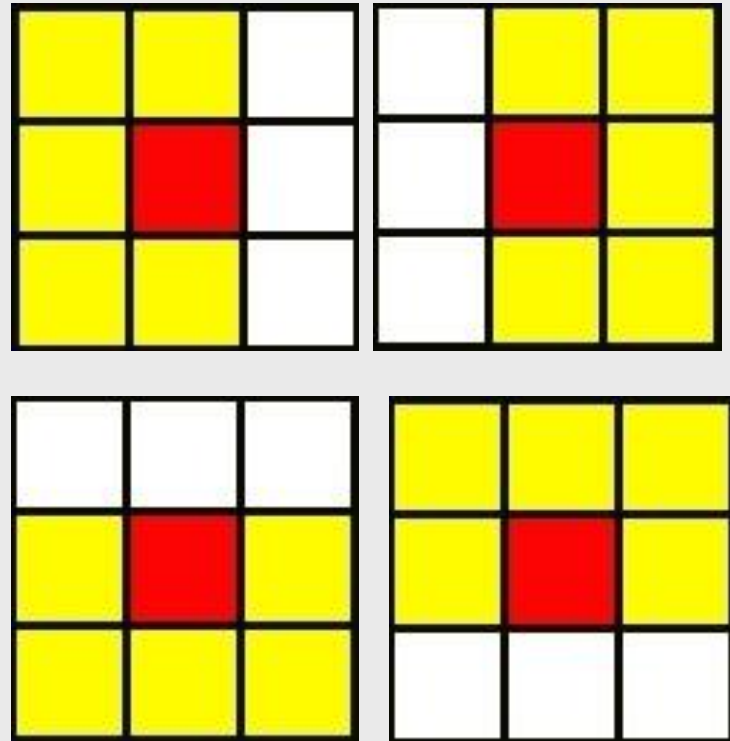
Przestrzeń 2 D automatów komórkowych.



Otoczenie von Neumann + Moore

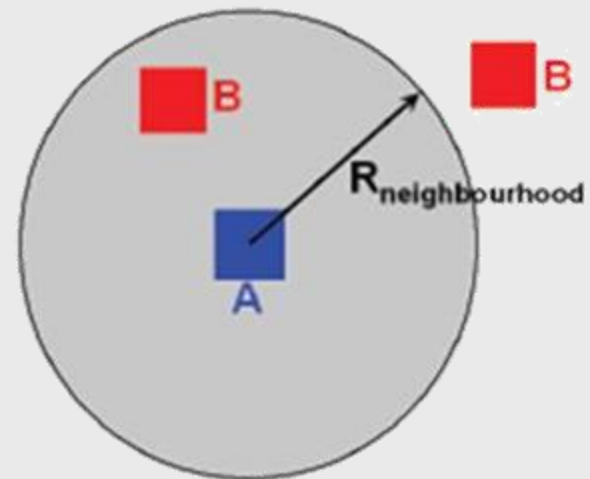
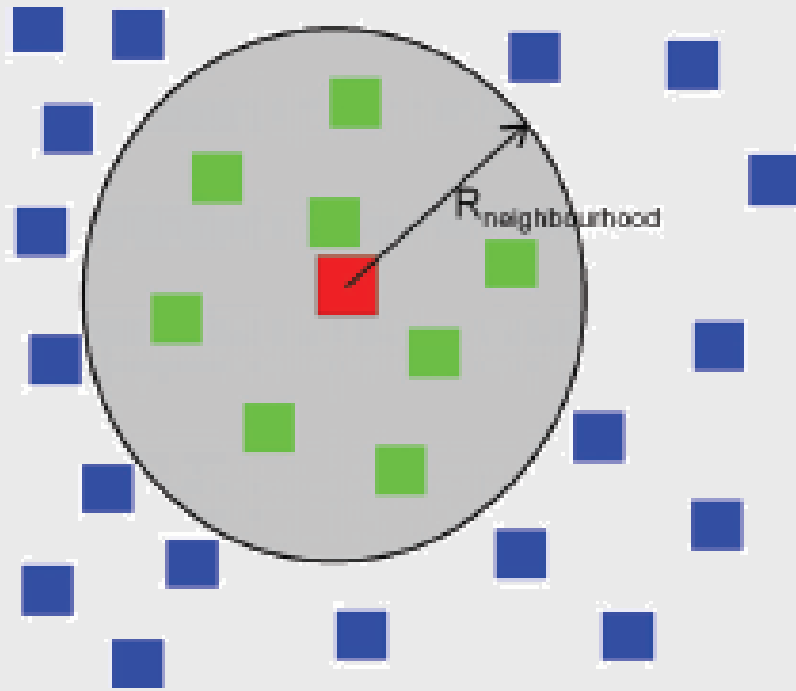
Otoczenie heksagonalne

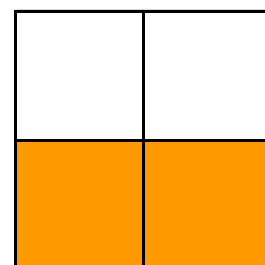
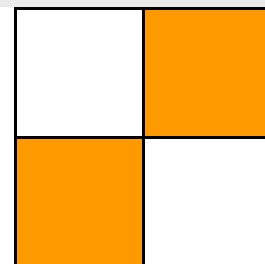
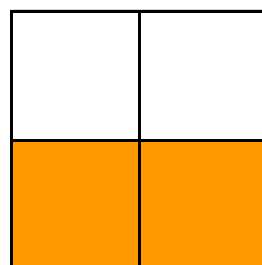
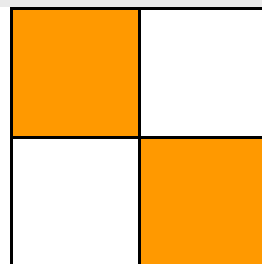
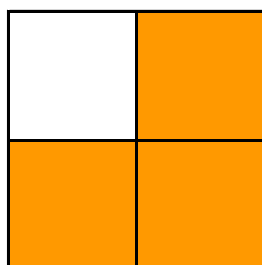
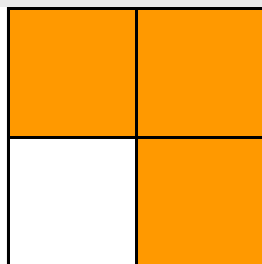
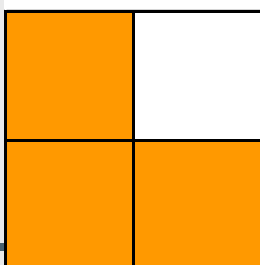
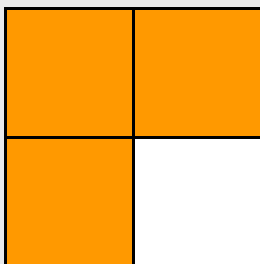
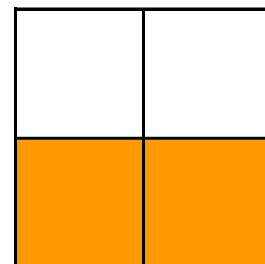
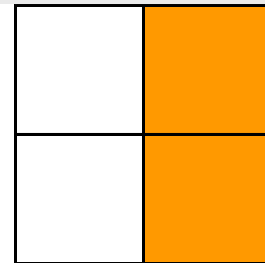
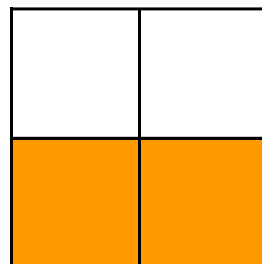
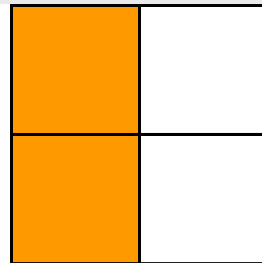
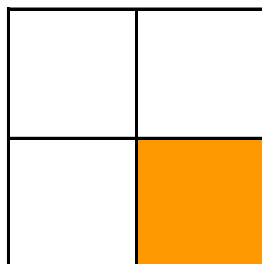
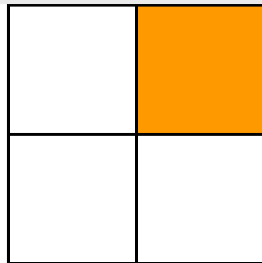
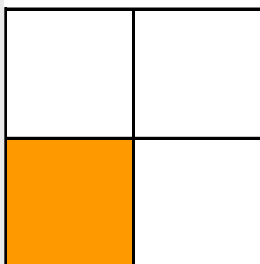
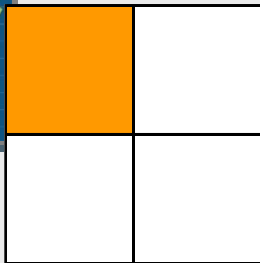
Otoczenie pentagonalne





Random CA

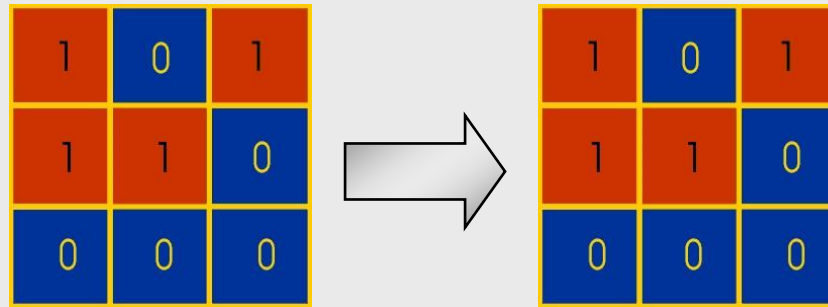






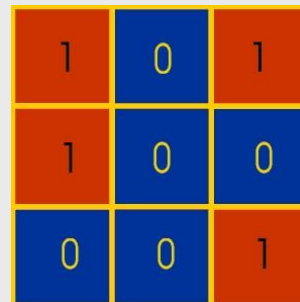
Game Of Life - J.H. Conway

Każda żywa komórka posiadająca dwóch lub trzech żywych sąsiadów (komórki w stanie 1), pozostaje żywą (utrzymuje stan 1),



Każda żywa komórka posiadająca więcej niż 3 sąsiadów umiera, z “natłoku” oraz każda żywa komórka posiadająca mniej niż dwóch sąsiadów

również umiera, z “samotności”.



Modele konwencjonalne:

$$\sigma_p = f(\varepsilon)$$

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

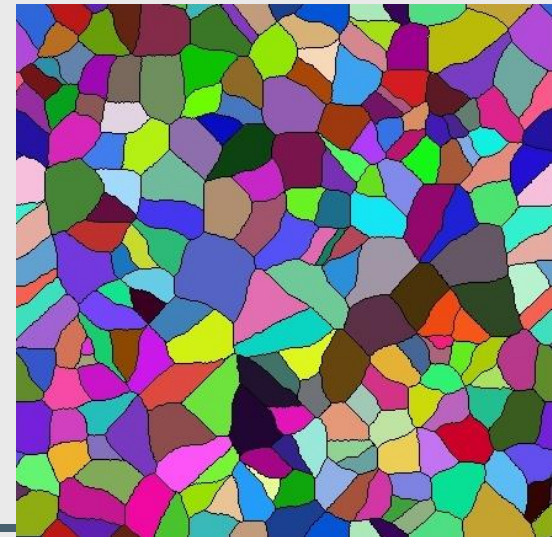
Modele zmiennych wewnętrznych

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

Modele oparte na metodach dyskretnych

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

The diagram shows the stress-strain relationship $\boldsymbol{\sigma} = \frac{2}{3} \frac{\sigma_p}{\dot{\varepsilon}_i} \boldsymbol{\varepsilon}$. The term σ_p is enclosed in a red circle. Three green arrows point towards this circle from the equations above: one from $\sigma_p = f(\varepsilon)$, one from $\sigma_p = f(\varepsilon, \mathbf{p})$, and one from $\sigma_p = f(t, \mathbf{p}, \mathbf{q})$.





Zastosowania w metalurgii

- modelowanie zjawiska rekrytalizacji statycznej
- modelowanie zjawiska rekrytalizacji dynamicznej
- modelowanie zjawiska rozbudowy granicy ziarna
- modelowanie zjawiska inicjalizacji pęknięć
- modelowanie zjawisk termomechanicznych
- modelowanie zjawiska lokalizacji odkształcenia
- modelowanie przemian fazowych





Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału





Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

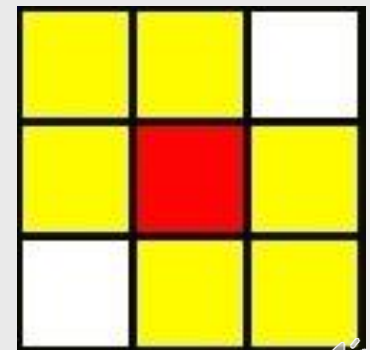
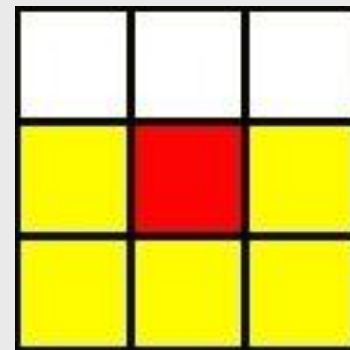
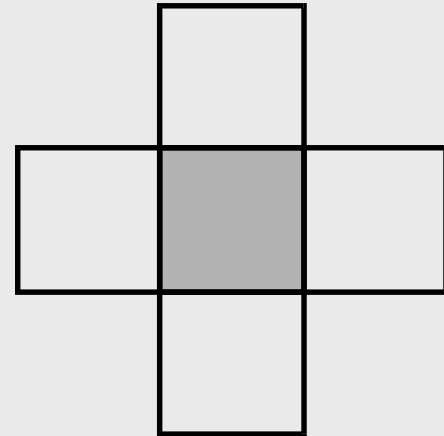
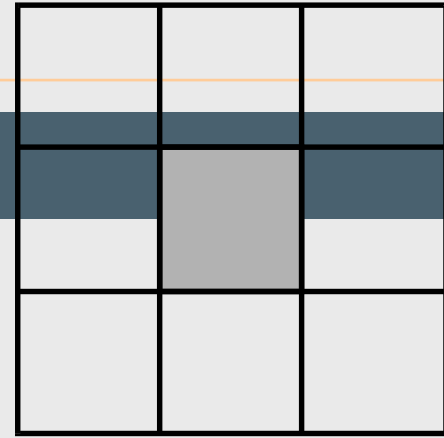
Wymiar przestrzeni: 2D lub 3D

Sąsiedztwo: Moore, von Neuman, random hexagonal, random pentagonal

Ilości stanów komórki: 2 - „pusta” lub „ziarno”



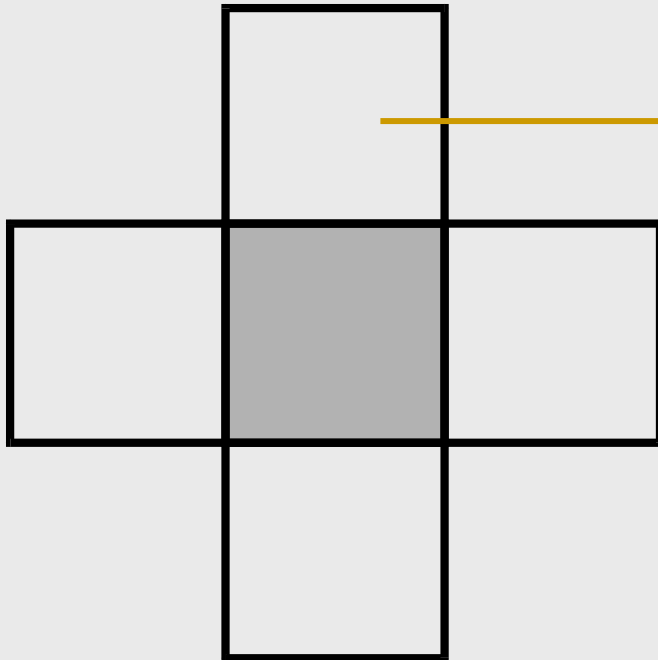
Zmienne wewnętrzne CA



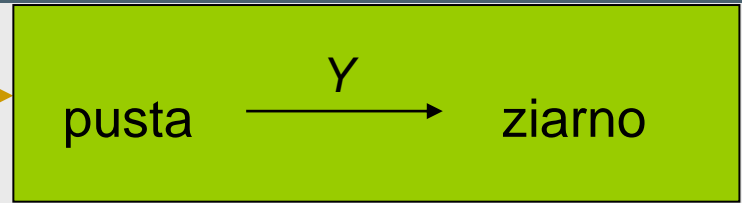


Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

Zmienne wewnętrzne CA

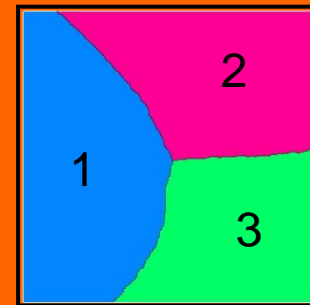


stan

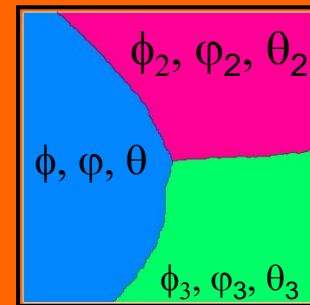


Zmienne wewnętrzne

- do którego ziarna należy



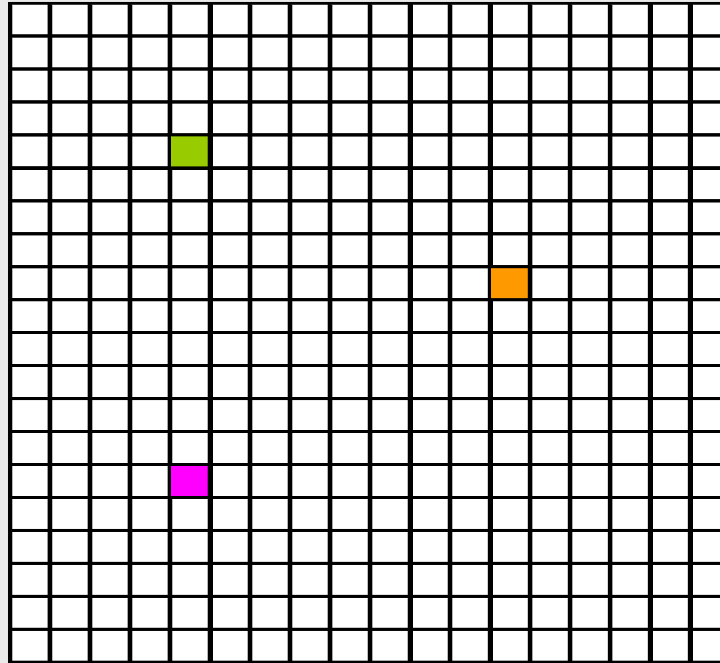
- O orientacji krystalograficznej








Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

Zarodkowanie



Losowy wybór komórek i zmiana stanu na komórkę, przypisanie wartości zmiennym wewnętrznym: numer ziarna, orientacja krystalograficzna

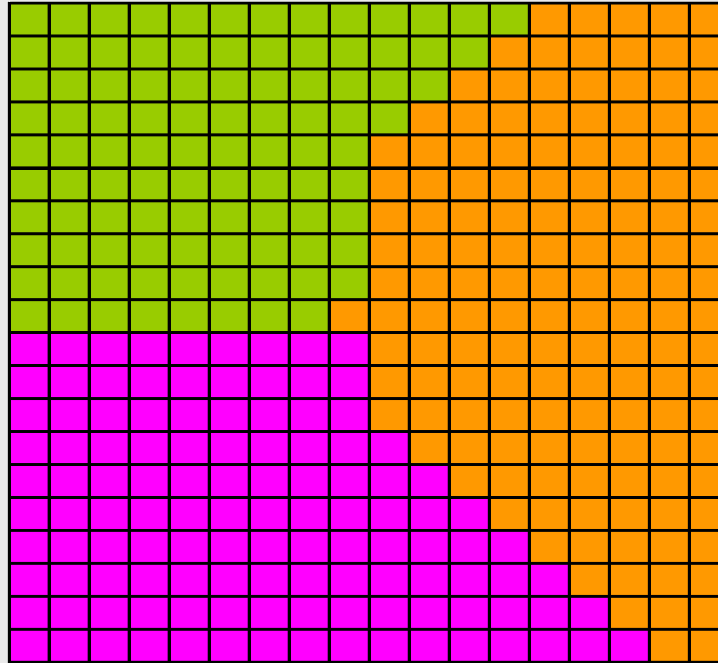
 Ziarno nr 1  Ziarno nr 2  Ziarno nr 3





Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

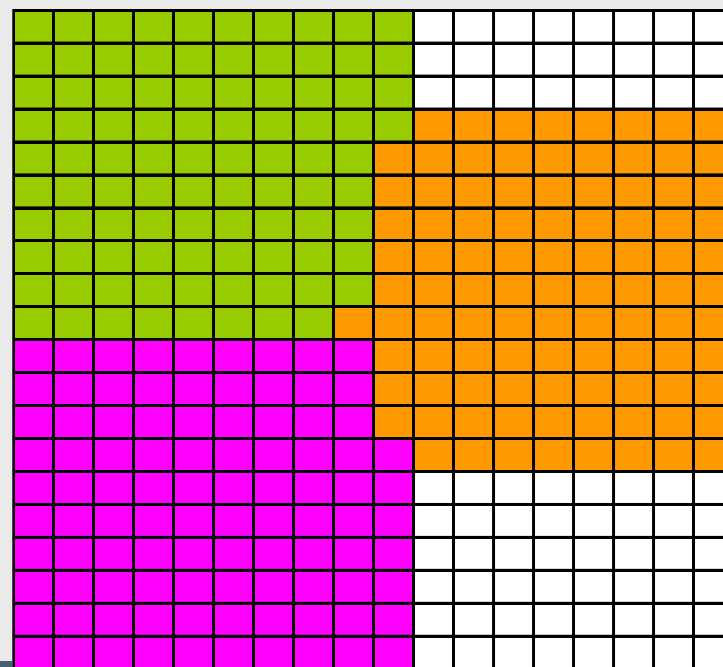
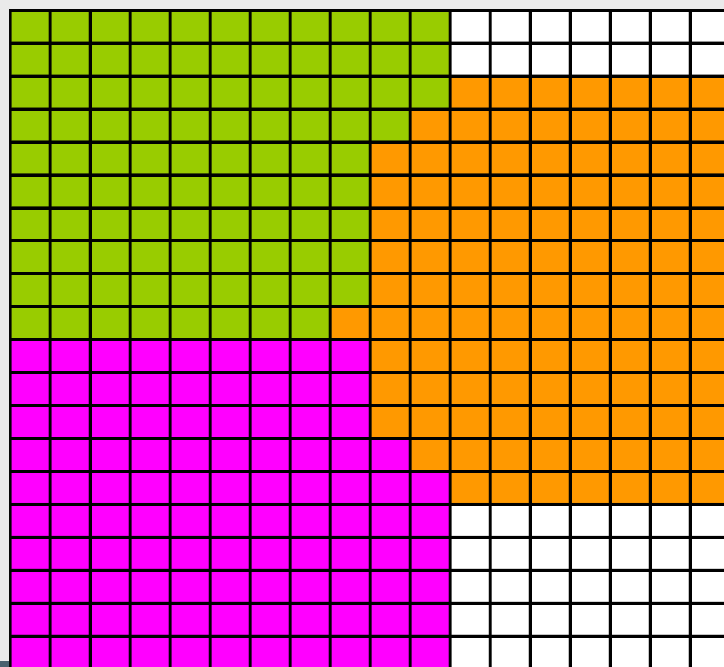
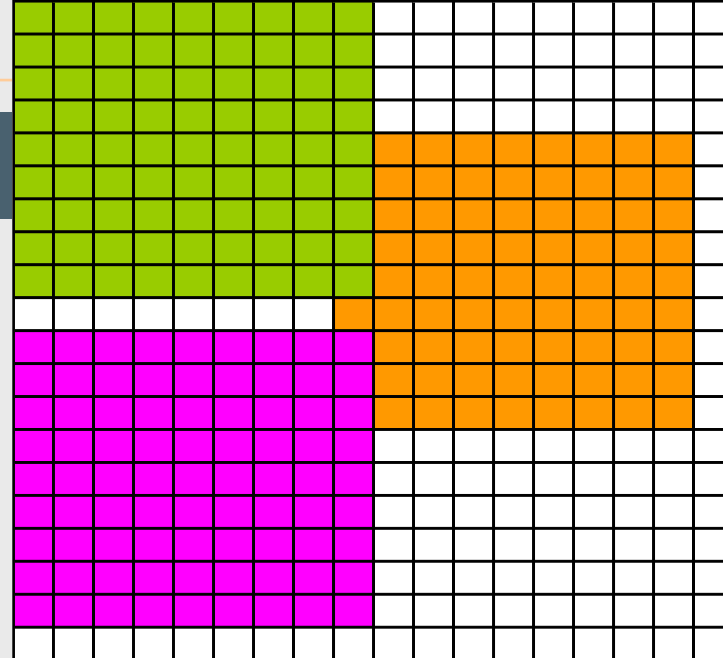
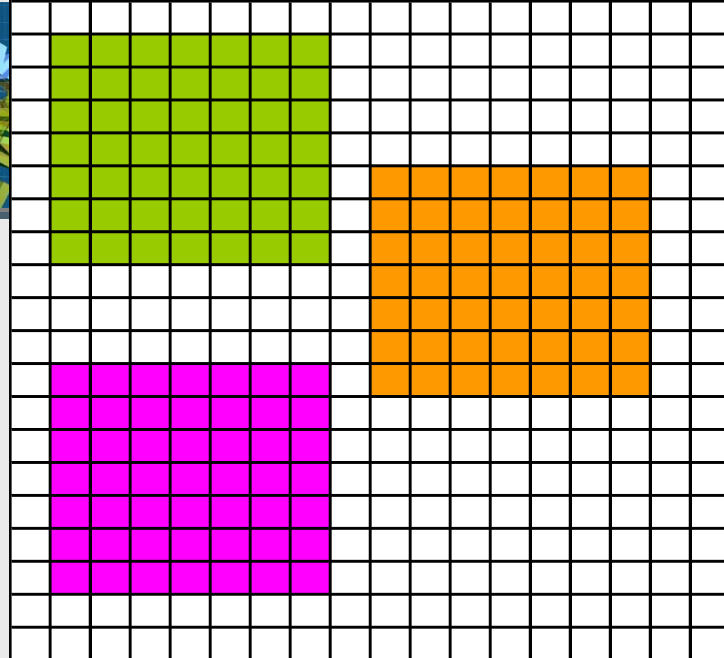
Rozrost

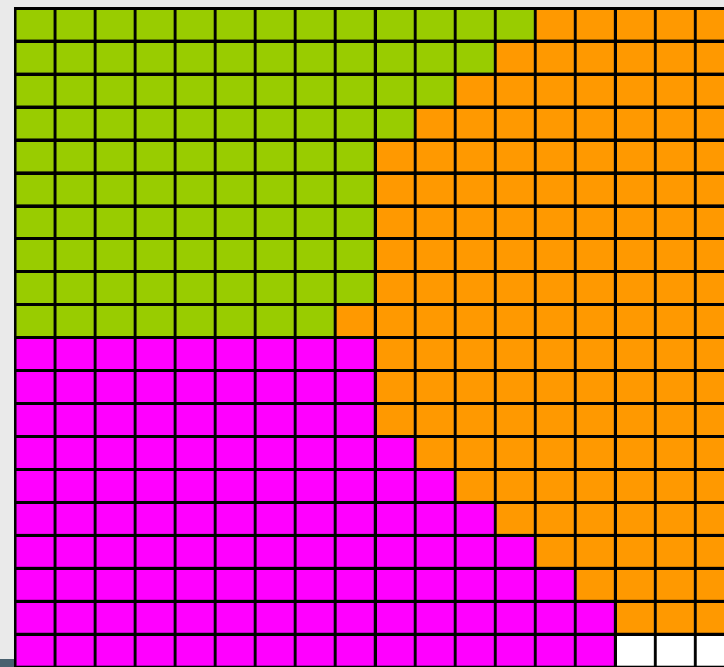
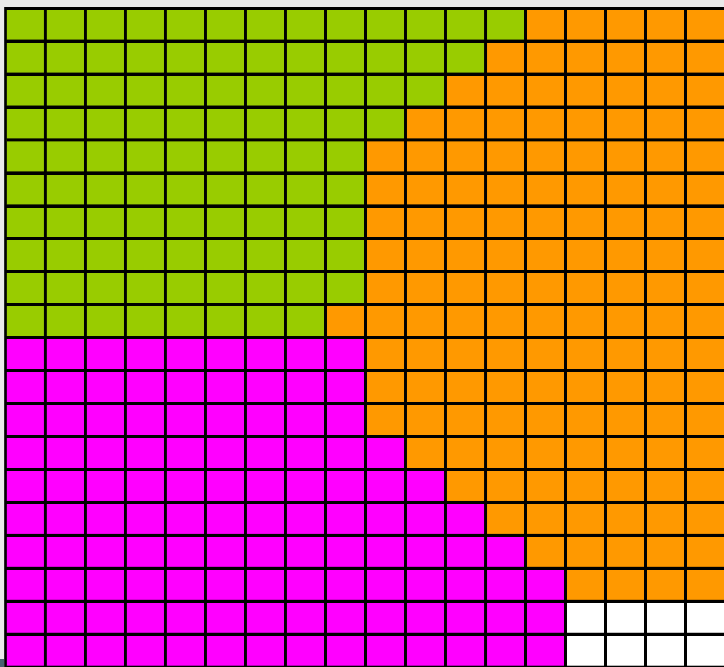
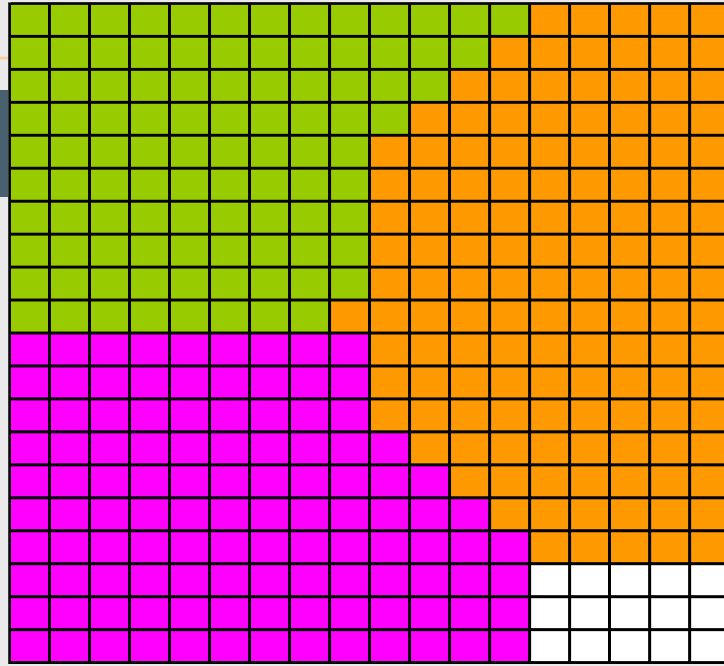
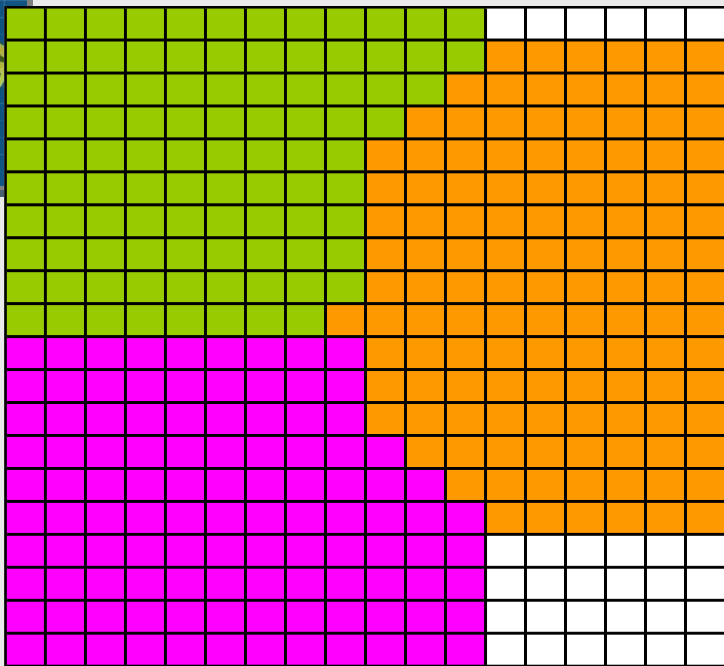


Jeżeli sąsiad danej komórki w poprzednim kroku był w stanie ziarno to komórka również zmienia stan na „ziarno”. Zmienne wewnętrzne przejmuje takie jakie posiada większość jej sąsiadów w stanie „ziarno”.

W przypadku takiej samej liczby sąsiadów o różnych własnościach, wprowadza się losowość wyboru.





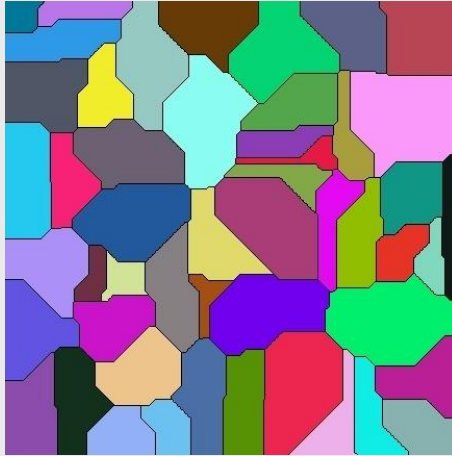




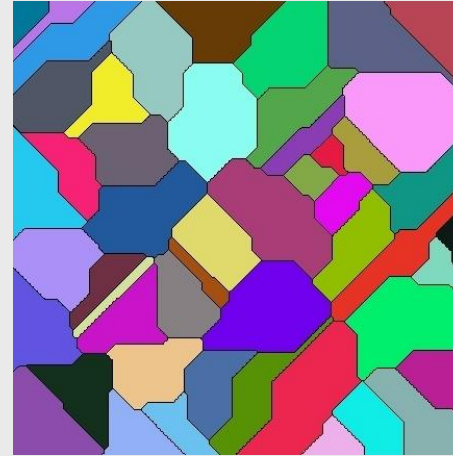
Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

Problem doboru sąsiedztwa

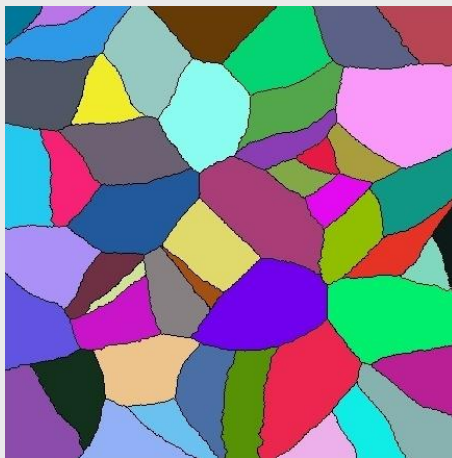
Von Neumanna



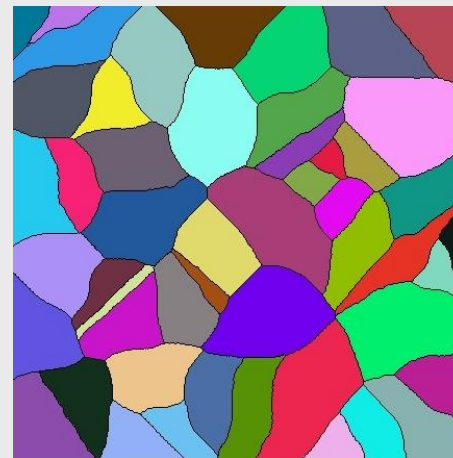
Moore



pentagonalne



heksagonalne

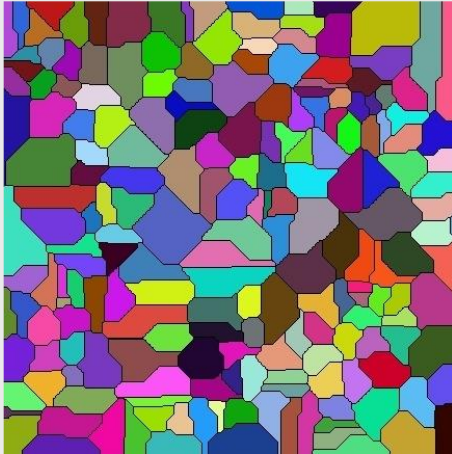




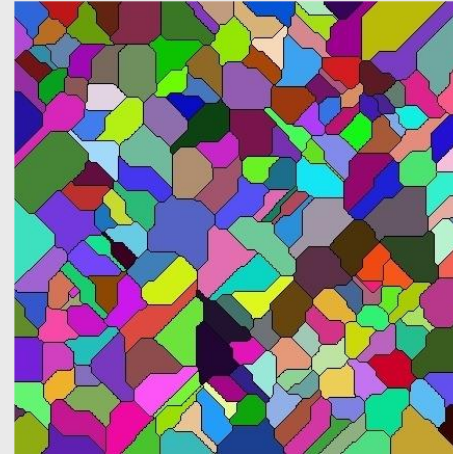
Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

Problem doboru sąsiedztwa

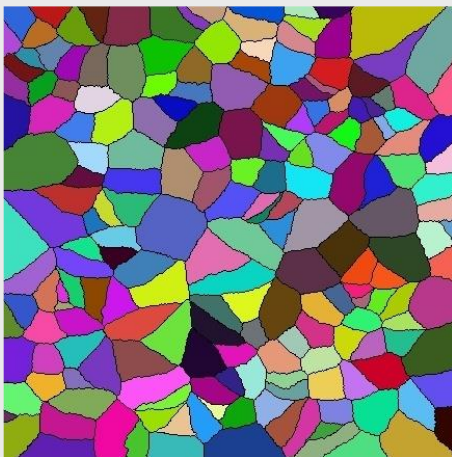
Von Neumanna



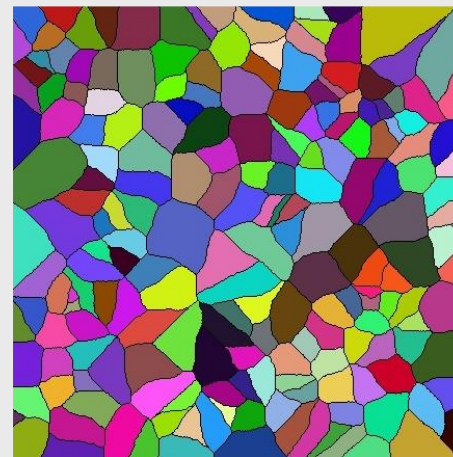
Moore



pentagonalne



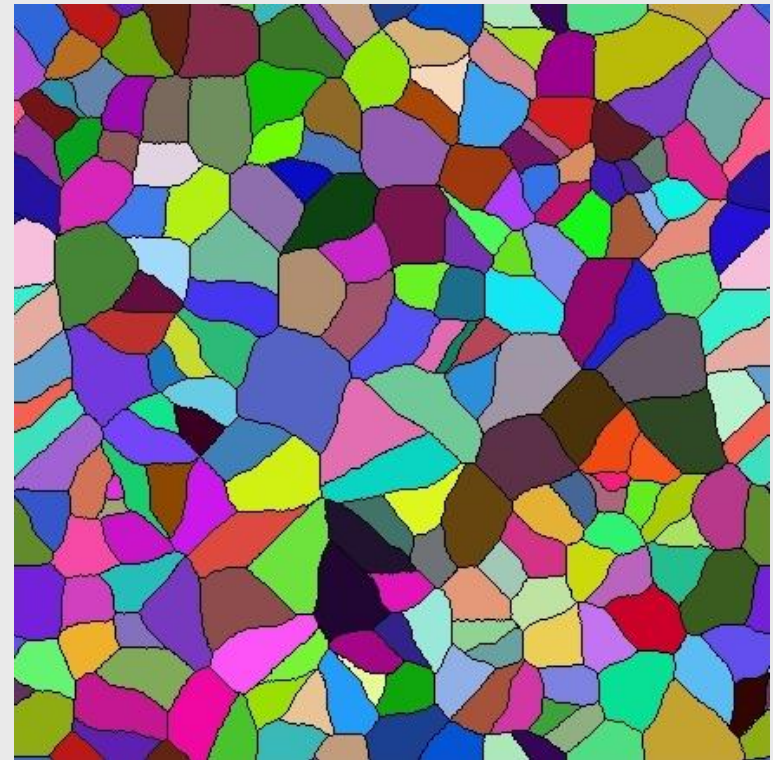
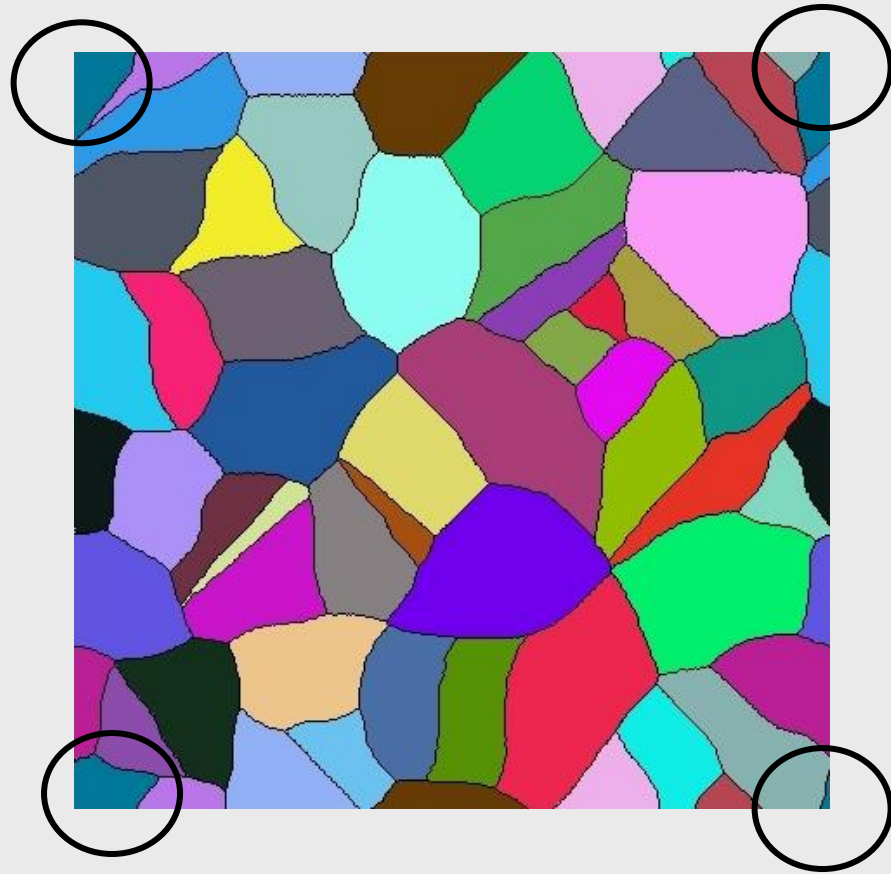
heksagonalne

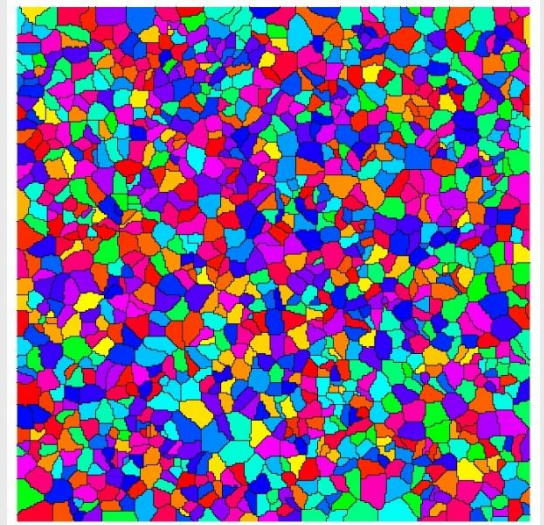
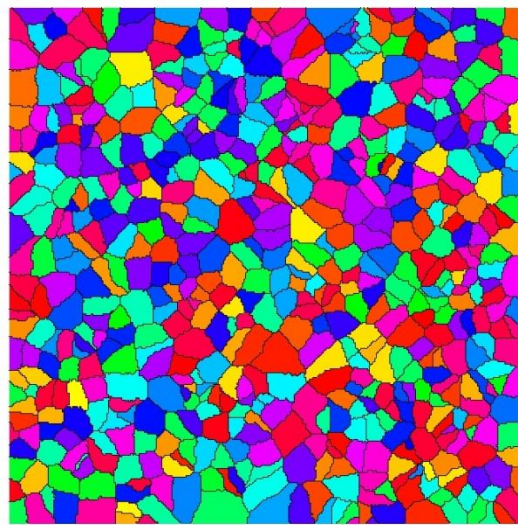
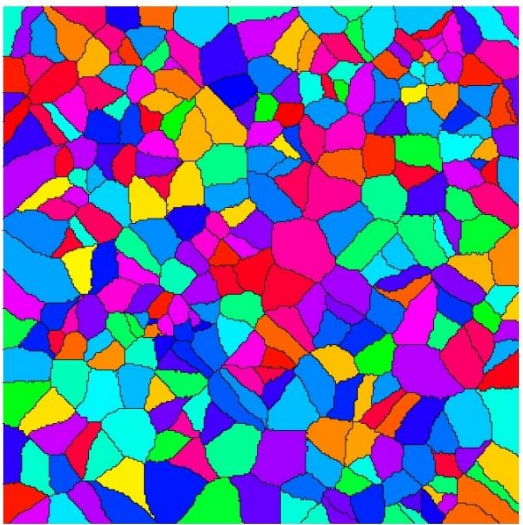
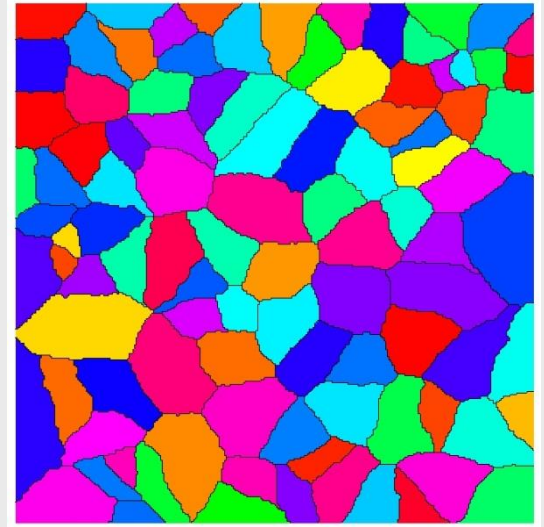
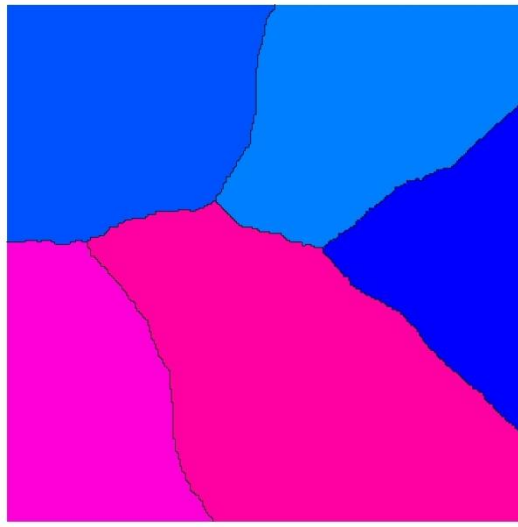
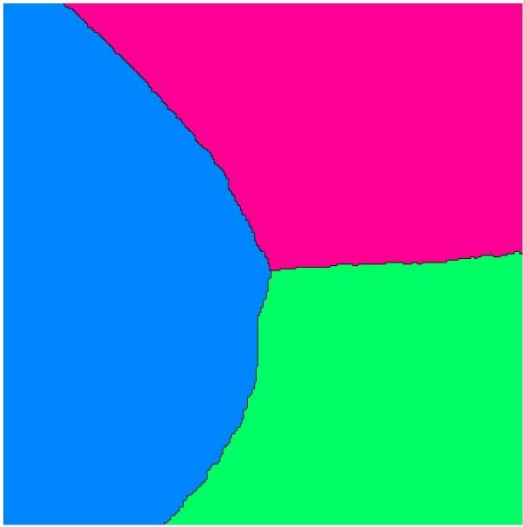




Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału

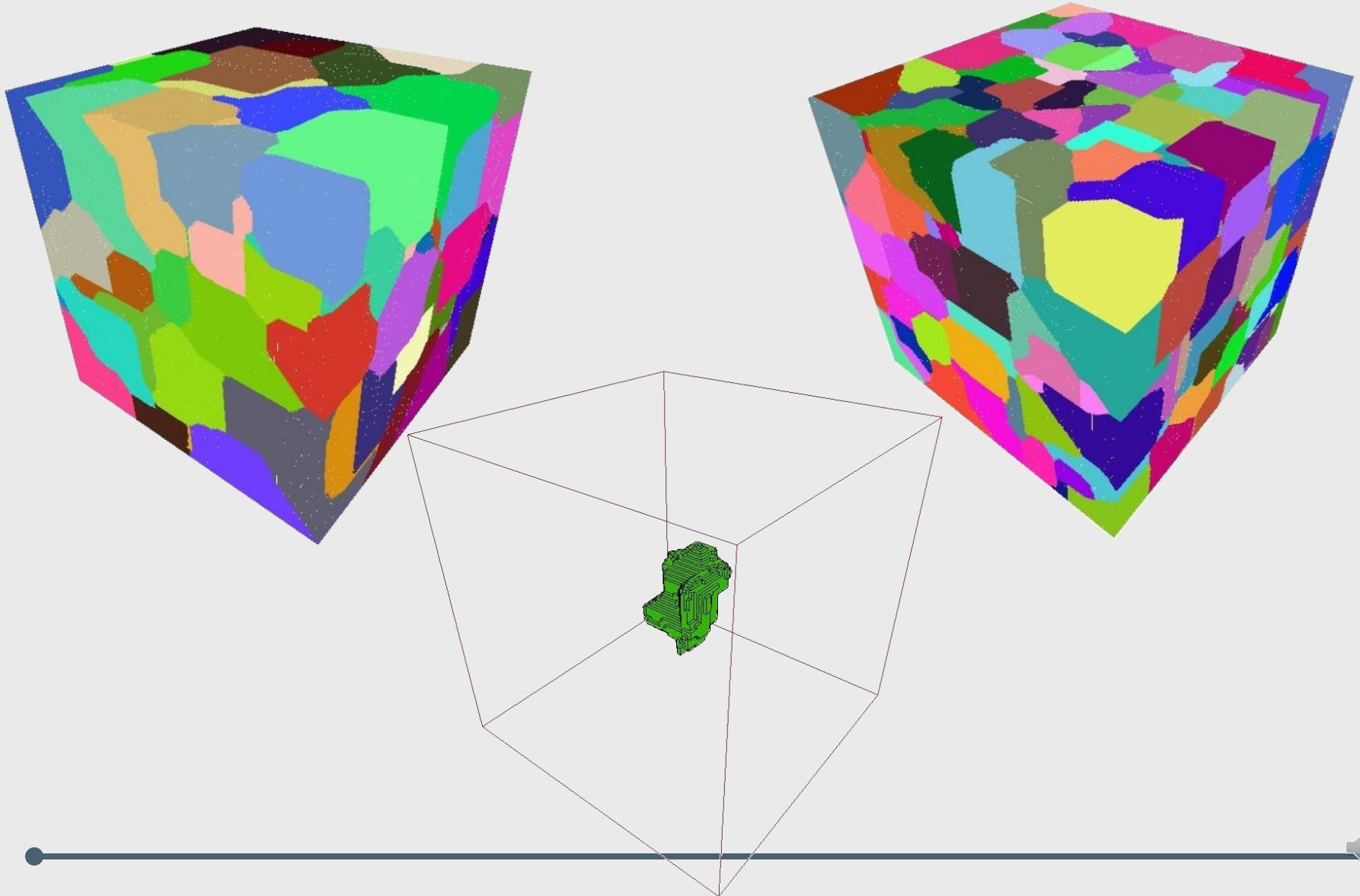
Periodyczny warunek brzegowy



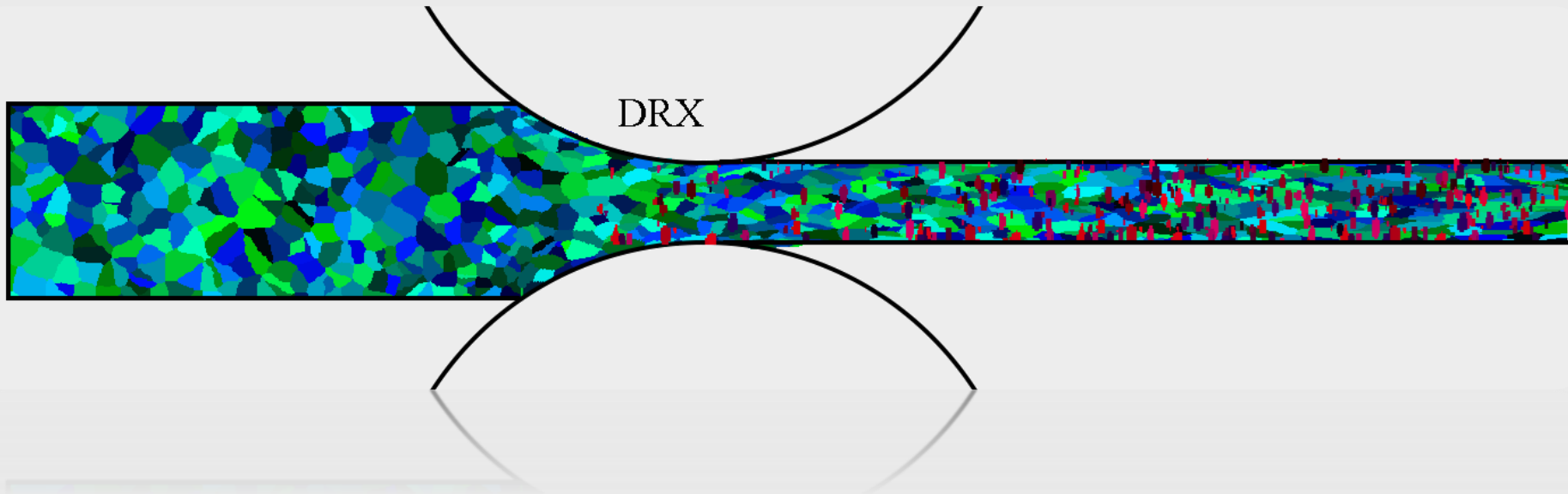




Naiwny rozrost ziaren mikrostruktury materiału



Modelowanie zjawiska rekrytalizacji dynamicznej oraz rozwoju mikrostruktury w trakcie przeróbki plastycznej na gorąco



Gawad J., Madej Ł., Szeliga D., Pietrzyk M., *Microstructure evolution modeling based on the rheological parameters using the cellular automaton technique*, *Mat. Konf. Forming 2004, Vysoke Tatry, Strebske Pleso 2004*, 67-70.



Model rekrytalizacji

Zastosowania w metalurgii

W literaturze funkcjonuje kilka możliwości rozwiązania problemu modelowania rozwoju mikrostruktury w trakcie procesów przeróbki termomechanicznej. Każda z tych metod charakteryzuje się innym stopniem zaawansowania:

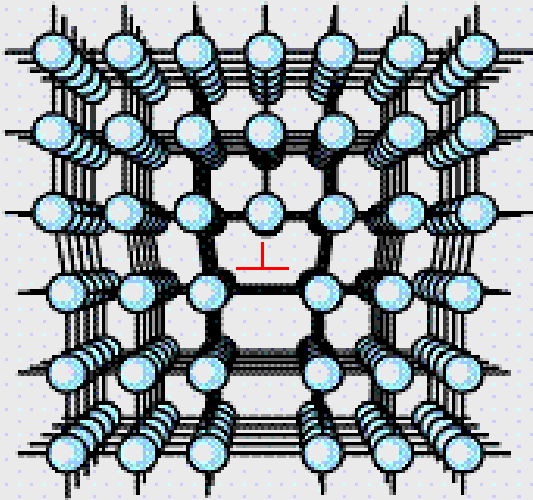
- różne otoczenia,
- różnorakie sformułowanie reguł przejścia
- różne modele matematyczne wspomagająca metodę automatów komórkowych.

Co za tym idzie dokładność otrzymywanych rezultatów również jest różna.





Model rekrytalizacji – szczypta teorii



Kryształ składa się z płaszczyzn atomowych, a defekt polegający na tym, że jedna z nich kończy się wewnątrz kryształu krawędzią nazywamy dyslokacją krawędziową

Dyslokacje w materiale mają możliwość przemieszczania się. Ruch ten zachodzi najczęściej w pewnych płaszczyznach i w pewnych kierunkach krystalograficznych, a najczęściej są to płaszczyzny i kierunki najgęstszego upakowania.

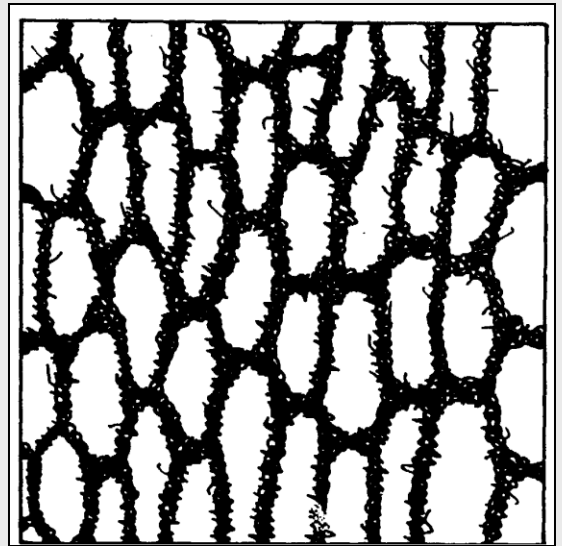
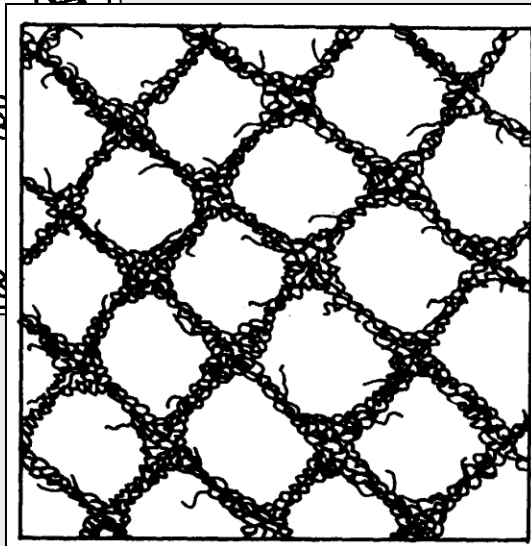
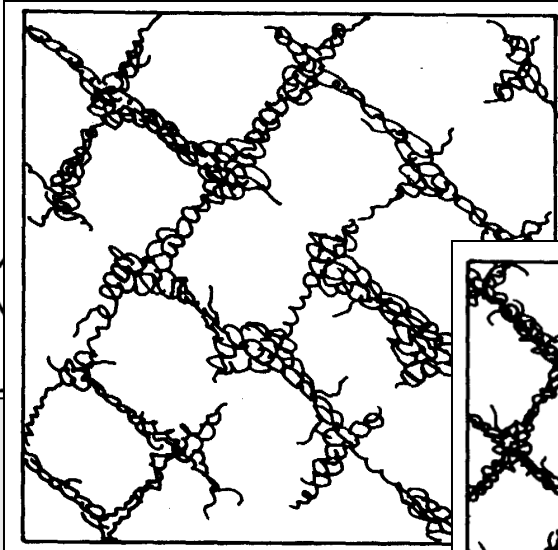
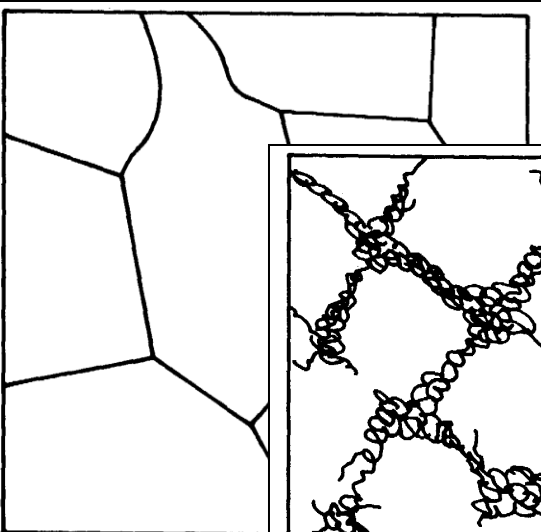
W materiale poddanym obciążeniu występuje wiele konkurujących ze sobą procesów. Najczęściej rozpatrywanymi są proces umocnienia, zdrowienia dynamicznego i statycznego, rekrytalizacji dynamicznej, metadynamicznej oraz statycznej. Wszystkie związane są z dyslokacjami.

Pojęcie gęstości dyslokacji

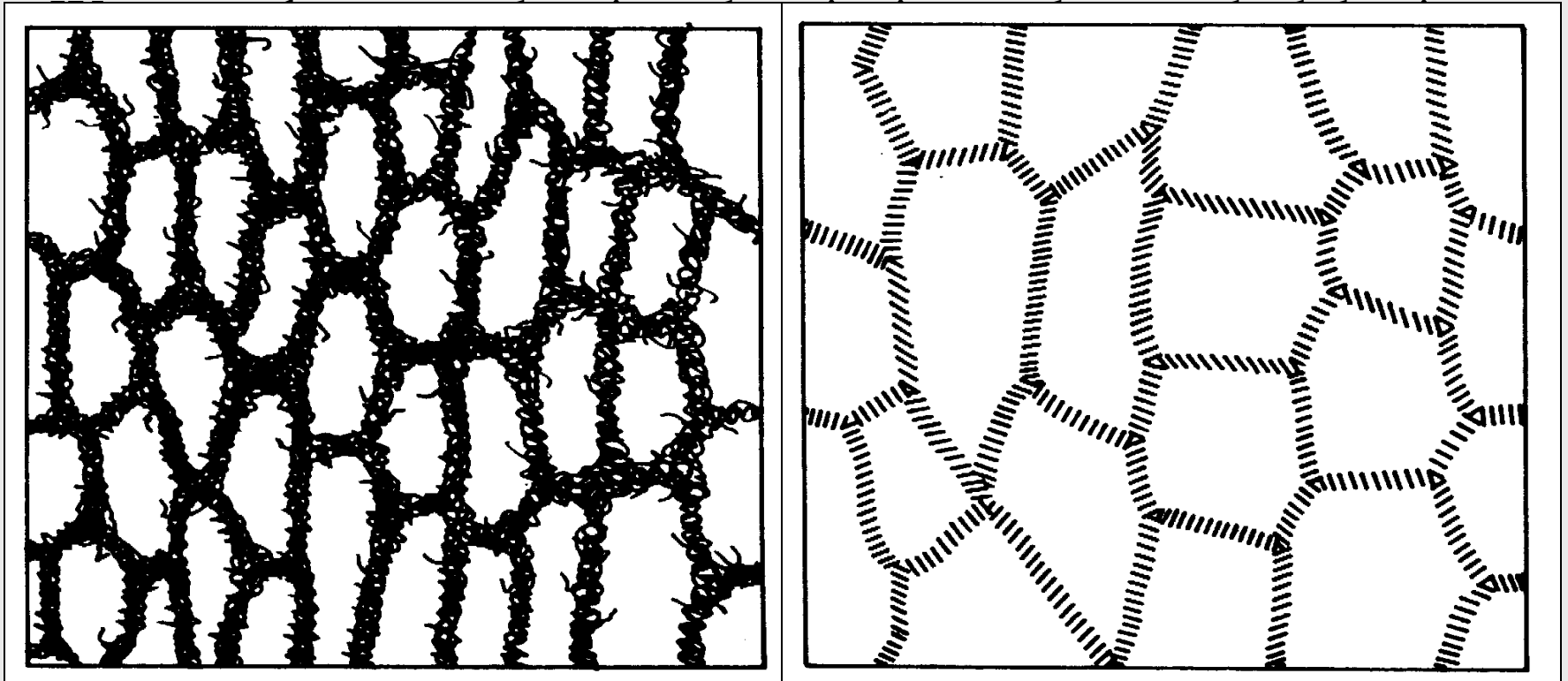


- **umocnienie**- wzrost gęstości dyslokacji.

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



- zdrowienie - spadek gęstości dyslokacji w wyniku ich anihilacji.



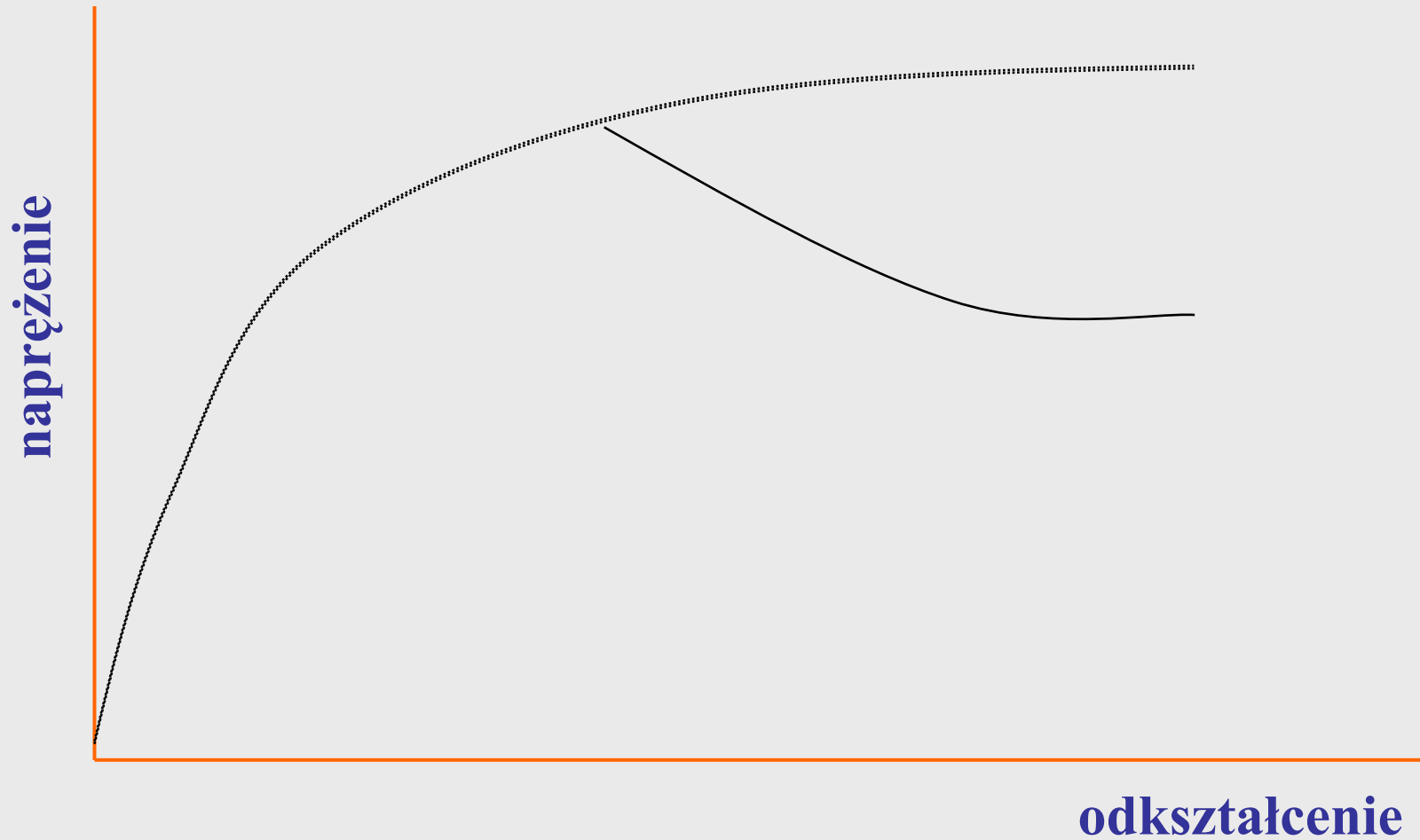


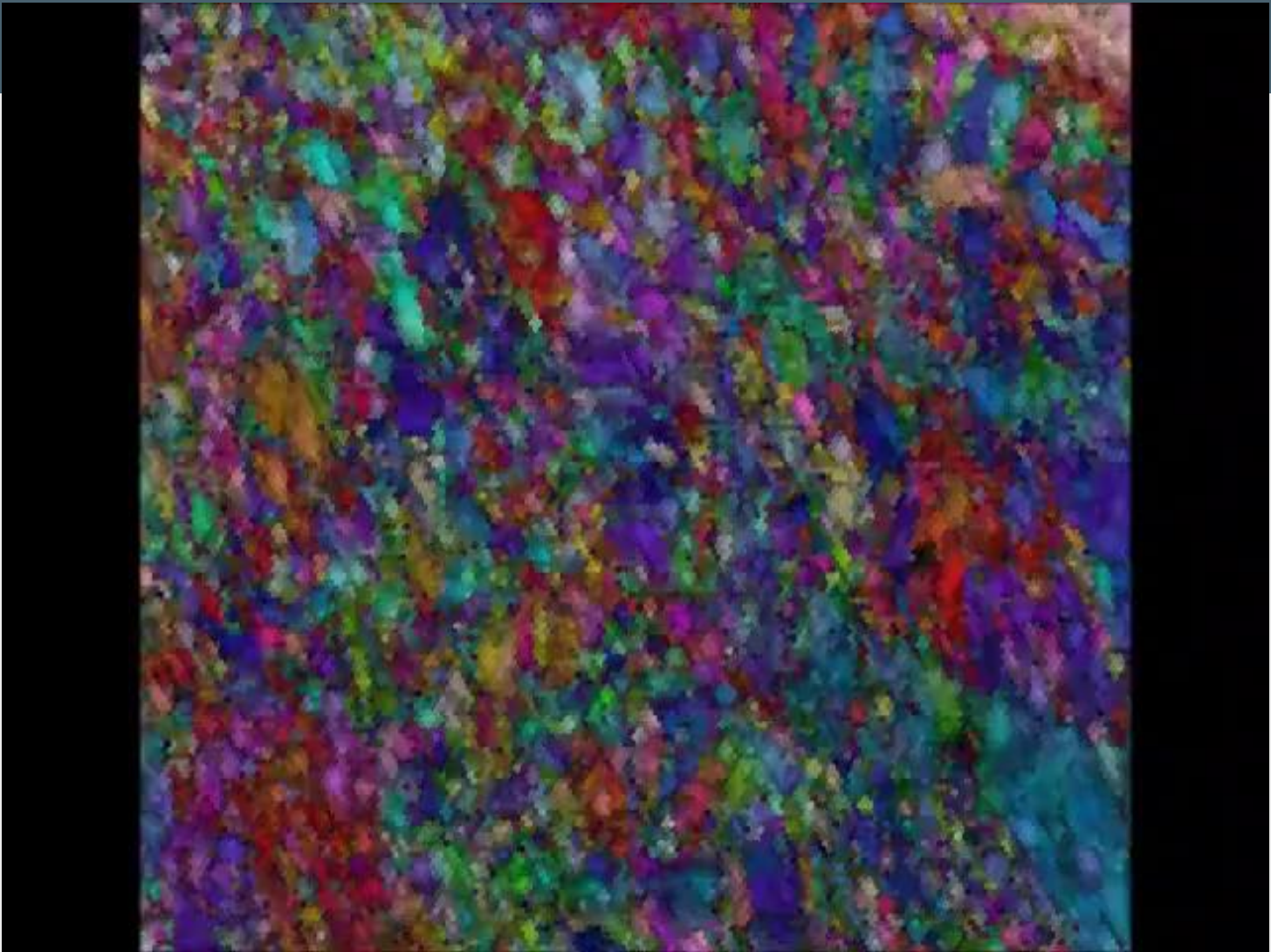
• **rekrytalizacje dynamiczną**, która pojawia się po przekroczeniu pewnej krytycznej wartości gęstości dyslokacji - ρ_c

Proces ten składa się z dwóch etapów:

- tworzenie (zarodkowanie) ziarn
- wzrost ziarn







Matt Nowell, EBSD Product Manager



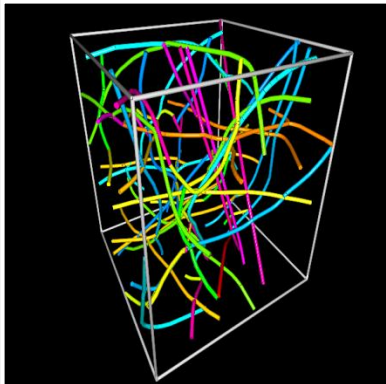


Model rekrytalizacji

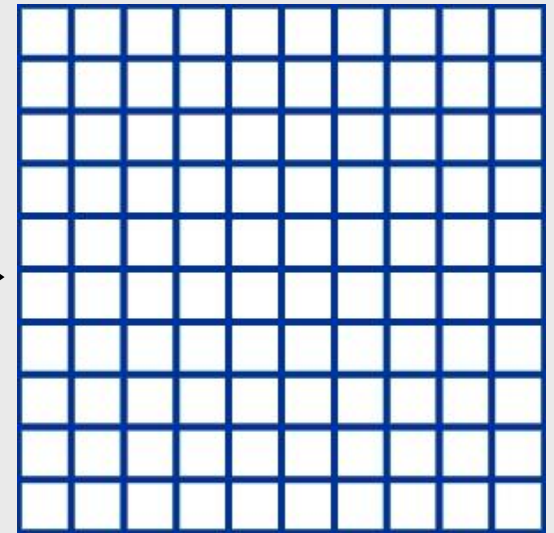
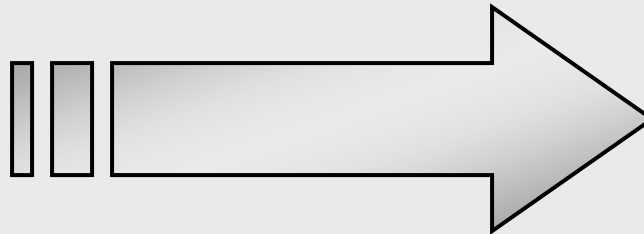
Model rekrytalizacji dynamicznej



Generacja pierwotnej mikrostruktury



Działo Dyslokacji



Automat Komórkowy



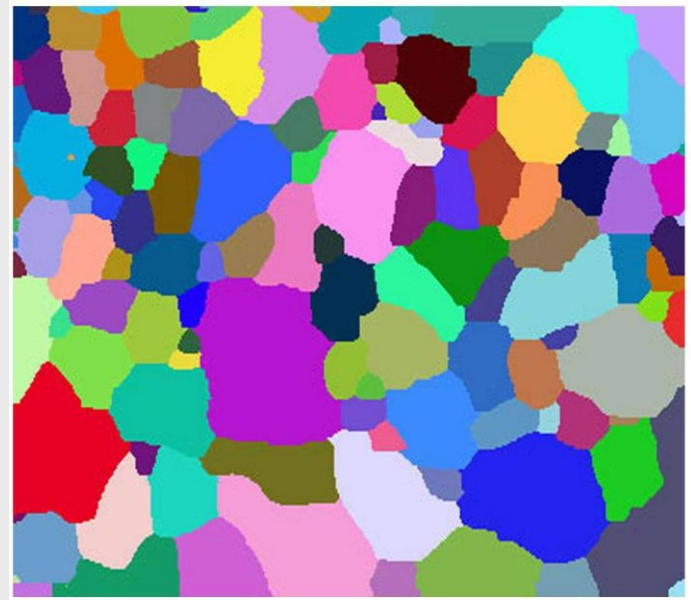
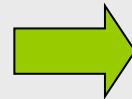
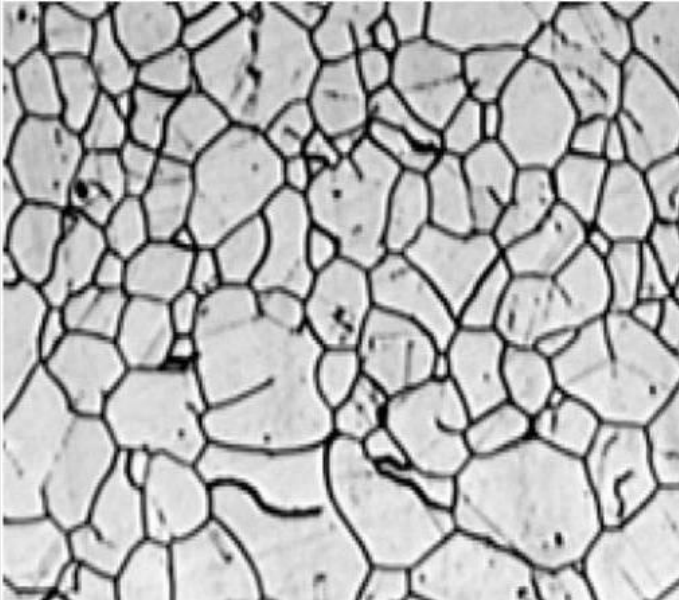


Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - pierwotna mikrostruktura

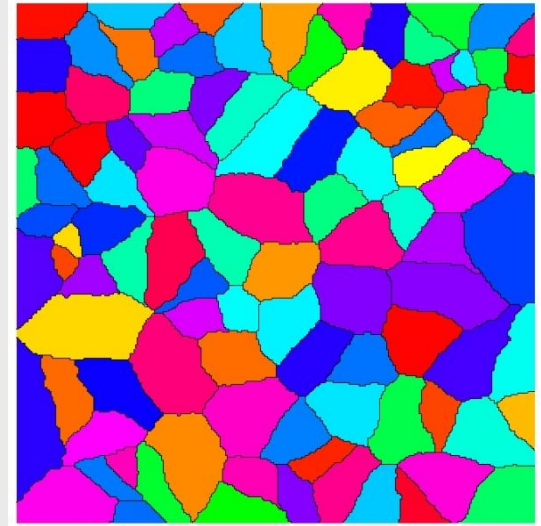
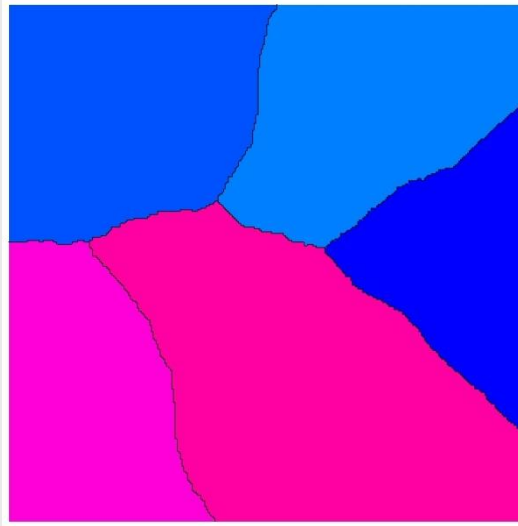
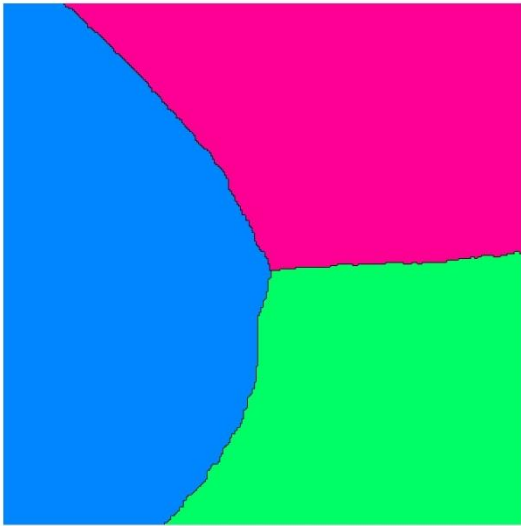
Pierwotną mikrostrukturę można uzyskać na kilka sposobów:

- bazując na rzeczywistym zdjęciu zglądu fragmentu próbki przed deformacją:

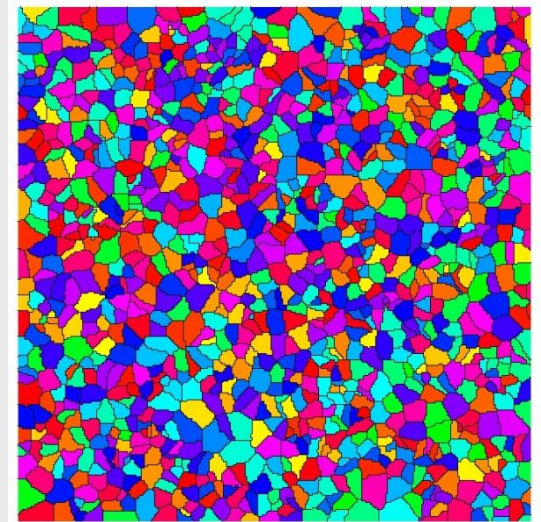
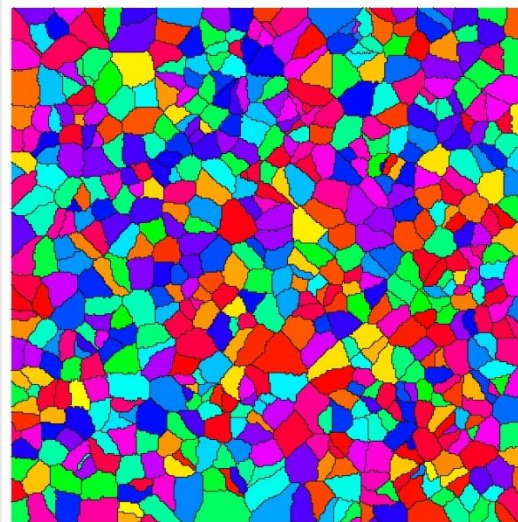
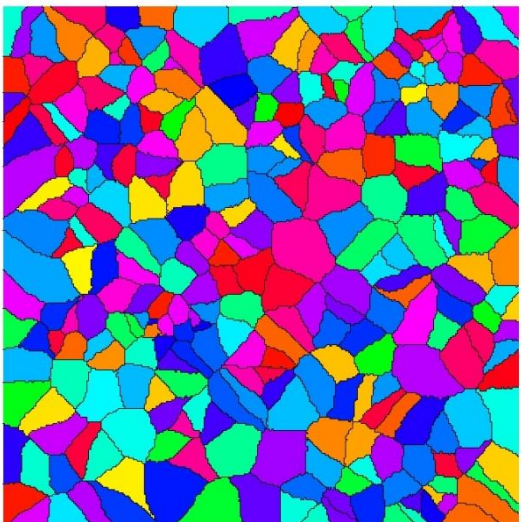




Model rekrytalizacji



Automaty komórkowe





Model rekrytalizacji – szczypta teorii

Symulacja procesu umocnienia oraz zdrowienia.

W każdym kroku czasowym wraz z postępującym procesem odkształcenia w materiale generowane są dodatkowe dyslokacje, w wyniku czego gęstość dyslokacji wzrasta od wartości około 10^6 do wartości 10^{12} - 10^{14} . Wzrost gęstości dyslokacji jest kontrolowany zgodnie z modelem zmiennych wewnętrznych, równaniem opisującym zmiany średniej wartości gęstości dyslokacji w czasie.





Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - działo dyslokacji

Działo dyslokacji bazuje na analitycznym rozwiązaniu równania konstytutywnego *modelu zmiennych wewnętrznych* opisującego procesy umocnienia (A) i zdrowienia (B):

$$\frac{d\rho}{dt} = A - B\rho \quad \longrightarrow \quad \rho = \frac{A}{B} + \left(1 - \frac{A}{B}\right) e^{-Bt}$$

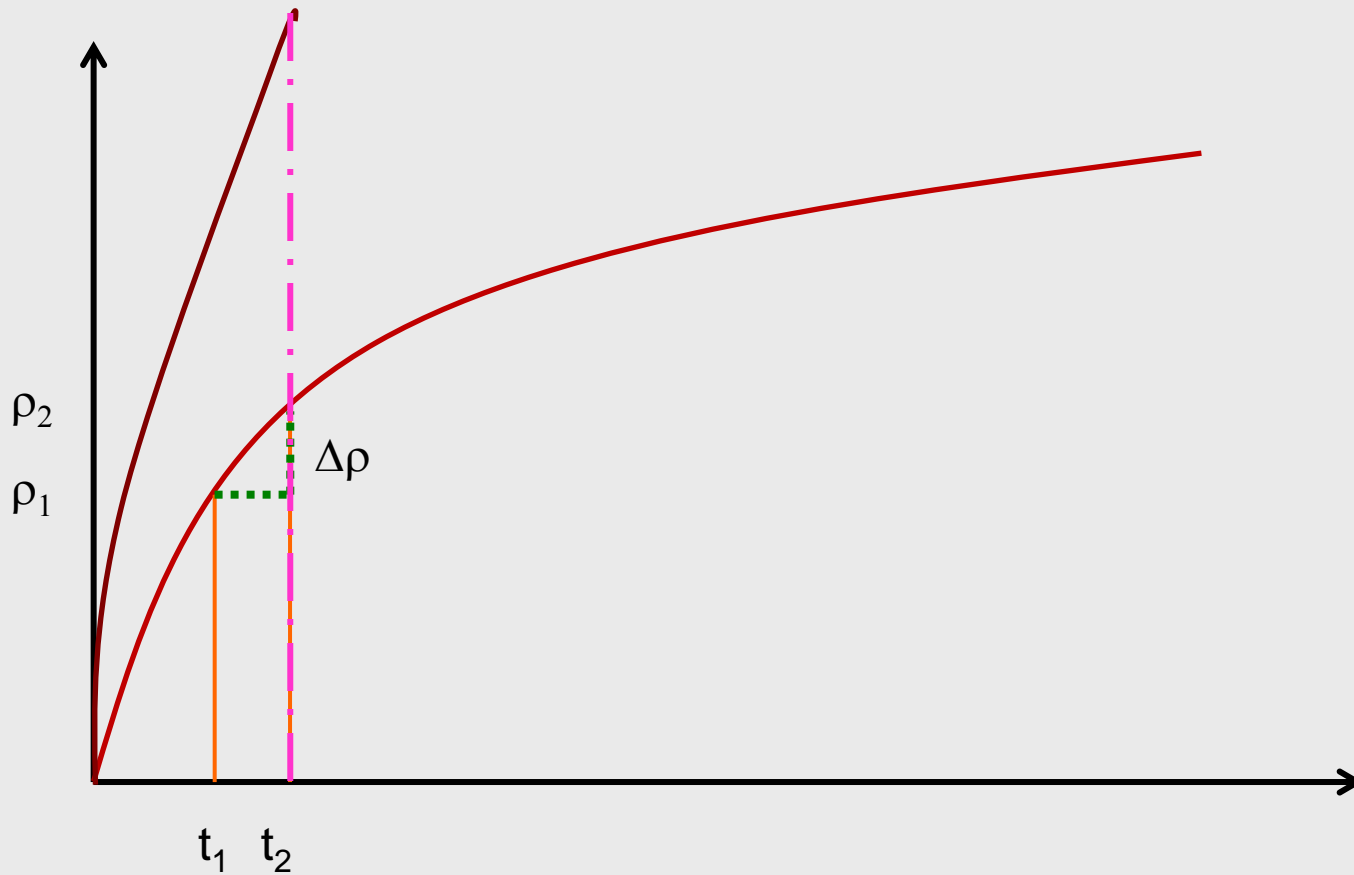
Gdzie: $A = \frac{\dot{\epsilon}}{bl}$ $B = k_{20} \dot{\epsilon}^{(1-m)} \exp\left(\frac{Q_s}{RT}\right)$

Parametry materiałowe występujące w równaniach są zidentyfikowane przy wykorzystaniu metody optymalizacji *Simplex*.





Model rekrytalizacji

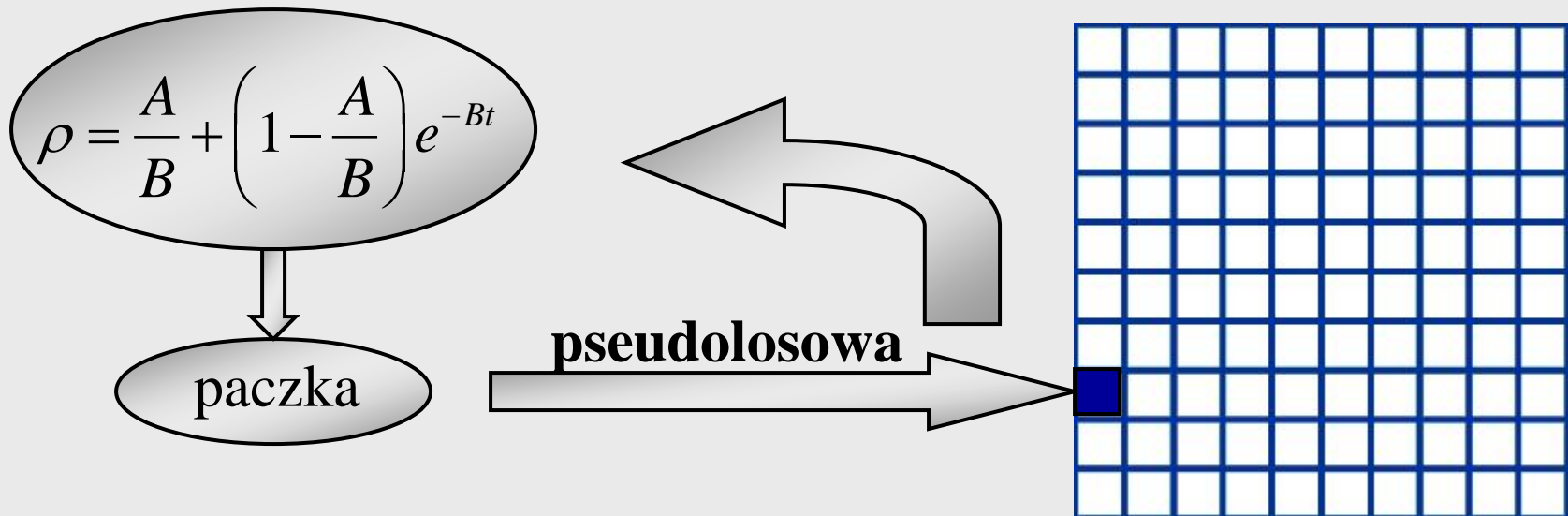




Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - działo dyslokacji

W każdym kroku czasowym obliczona **pula dyslokacji** jest wprowadzana do przestrzeni automatów komórkowych. Parametrem kontrolującym ten pseudolosowy proces jest ściśle ustalony rozmiar paczki która może trafić do danej komórki.





Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

W modelu założono dwu wymiarowe alternatywne sąsiedztwo heksagonalne a każda komórka opisana jest zestawem zmiennych określających jej stan:

? aktualna wartość gęstości dyslokacji ρ_c

? zmienna określająca czy dana komórka zrekrystalizowała 

? zmienna określająca do którego ziarna dana komórka przynależy

1	1	1	1	2				
1	1	1	2	2				
1	1	1	2	2				
2	2	2	2	2				
3	3	3	3					
3	3	3	3	3				
3	3	3	3	3	3			

Przestrzeń CA





Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

W każdym kroku czasowym odbywa się proces migracji dyslokacji pomiędzy sąsiadami należącymi do **tego samego ziarna**. Ponieważ granice ziaren są to defekty struktury krystalicznej na których następuje gwałtowny wzrost gęstości dyslokacji w trakcie odkształcenia.

Każda komórka ściśle kontroluje ile dyslokacji jest w stanie oddać do sąsiada jak również ile dyslokacji jest w stanie przyjąć.





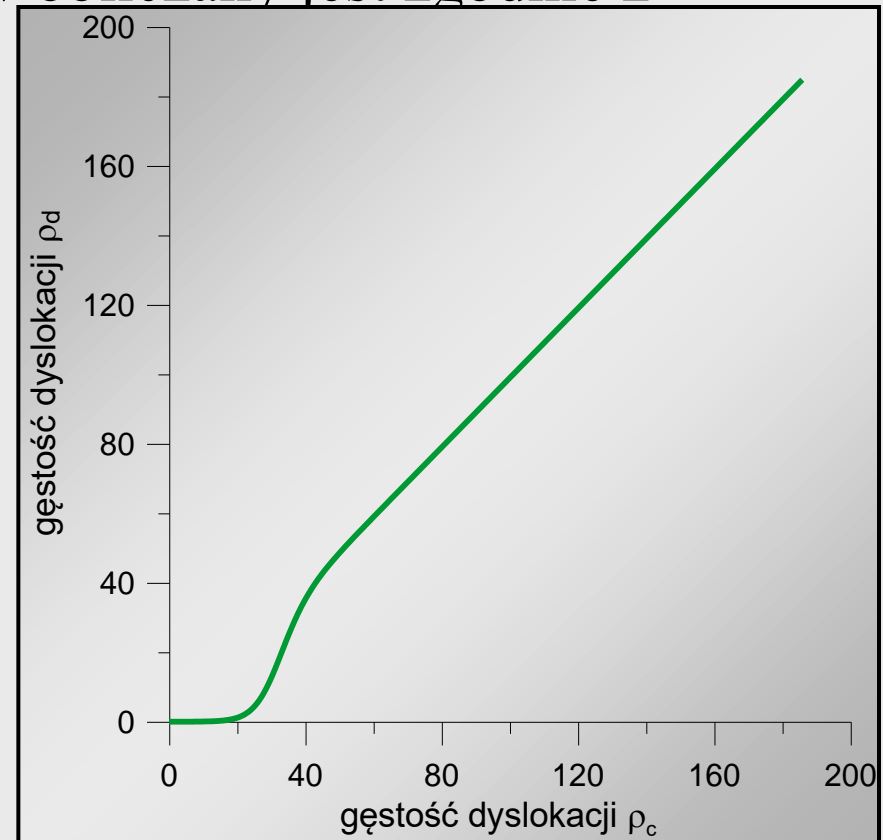
Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

Ułamek puli **przekazanej** do sąsiadów obliczany jest zgodnie z założoną zależnością:

$$x_d = \frac{\rho_d}{\rho} N_{(0,1)}$$
$$\rho_d = \begin{cases} 0 & : \rho < \rho_{sp} \\ (\rho - \rho_{sp}) \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\rho - \rho_{sp} - \rho_{gr}}{m}\right)} & : \rho \geq \rho_{sp} \end{cases}$$

$N(0,1)$ – prawdopodobieństwo z jakim komórka może oddać dyslokacje do sąsiadów, ρ_d całkowita pula dyslokacji, którą komórka jest w stanie przekazać do sąsiadów zgodnie z zależnością przedstawioną



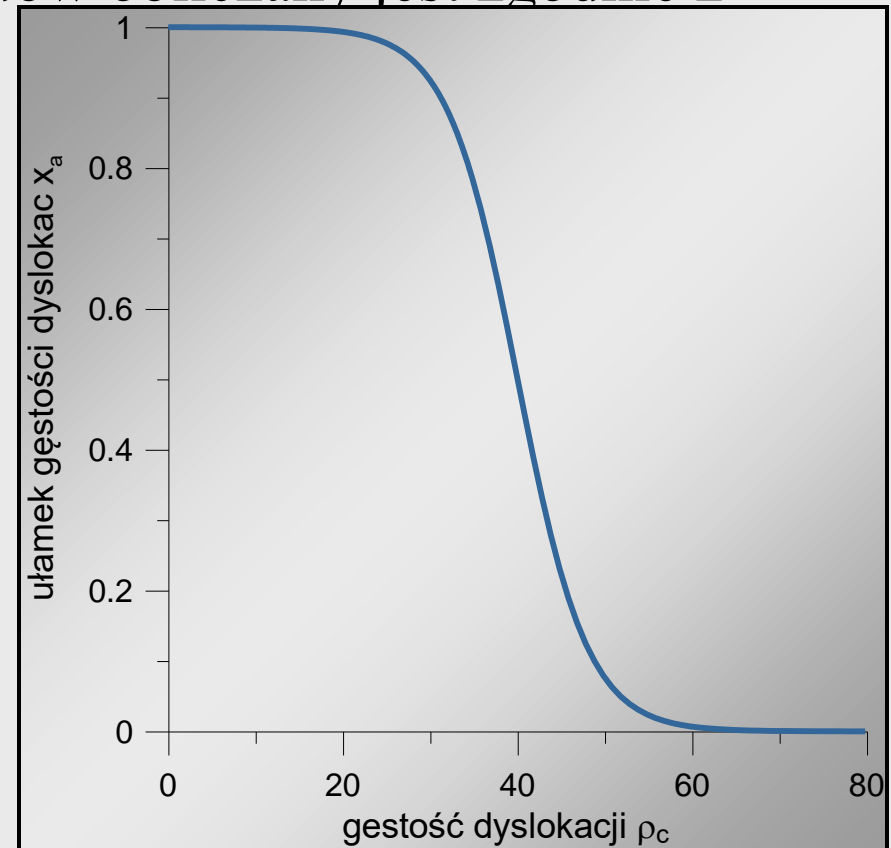


Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

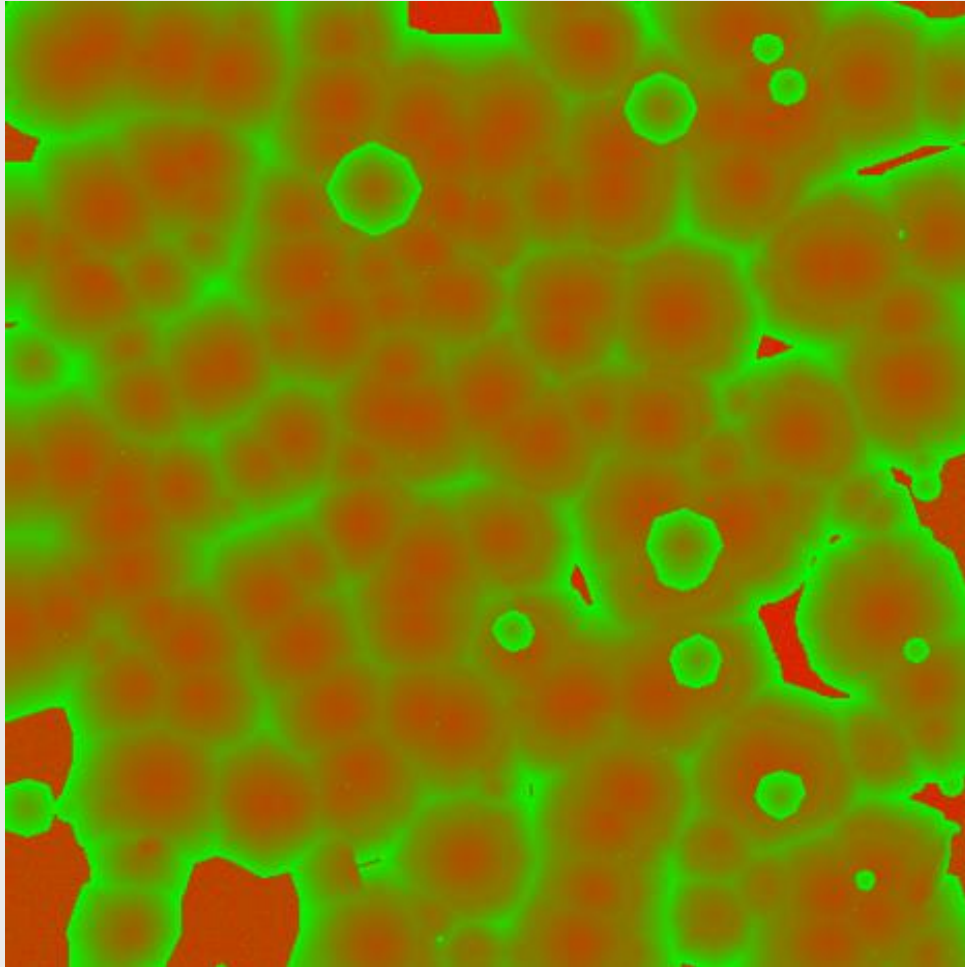
Ułamek puli **przyjmowanej** od sąsiadów obliczany jest zgodnie z założoną zależnością:

$$x_a = \left(1 + \exp\left(\frac{\rho - \rho_{0.5}}{n}\right) \right)^{-1}$$





Model rekrytalizacji





Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

Reguły przejścia

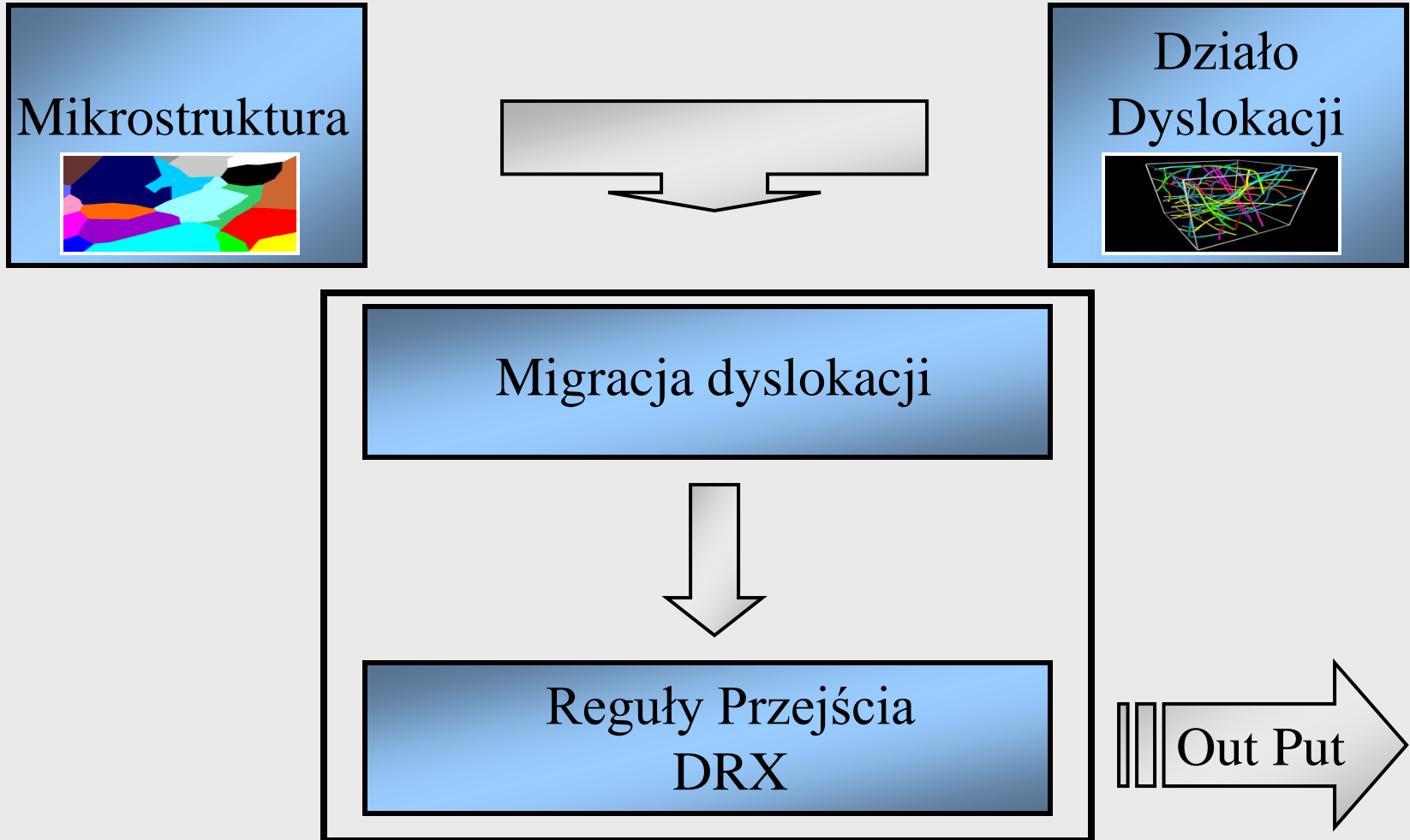
- W przypadku gdy w poprzednim kroku czasowym ($t-1$) któryś z sąsiadów komórki (i,j) uległ rekrytalizacji & gęstość dyslokacji w sąsiednich komórkach jest mniejsza niż gęstość dyslokacji w danej (i,j) komórce **to** ta komórka również ulega rekrytalizacji. Jej gęstość dyslokacji ρ_c ustawiana jest na poziom odniesienia.
- W przypadku gdy w danej (i,j) komórce przekroczona zostanie krytyczna wartość gęstości dyslokacji $\rho_c > \rho_{critical}$ & komórka znajduje się przy granicy ziarna **to** komórka staje się zarodkiem rekrytalizacji i jej gęstość dyslokacji również spada do poziomu odniesienia.





Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej





Model rekrytalizacji

Przykładowe wyniki obliczeń

Z modelu uzyskuje się wiele informacji dotyczących:

- rozwoju mikrostruktury
- ilości nowo powstałych ziaren
- średnicy ziaren
- informacje dotyczące procesu rekrytalizacji
- naprężenie uplastyczniające.

Naprężenie uplastyczniające obliczane jest z powszechnie znanej zależności:

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

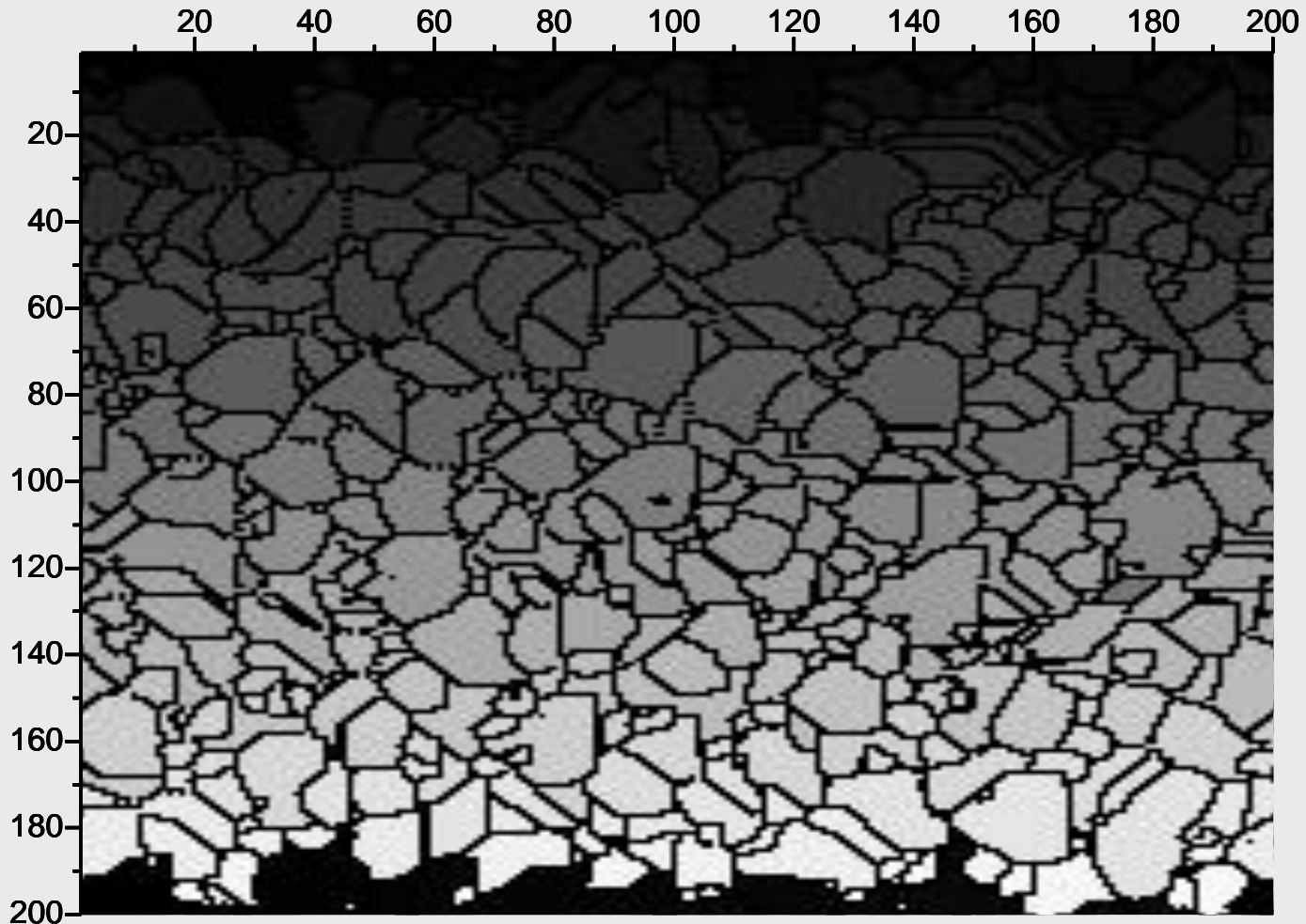
Wartości uzyskiwanych naprężeń umożliwią porównanie wyników obliczeń z wynikami uzyskanymi z modelu.





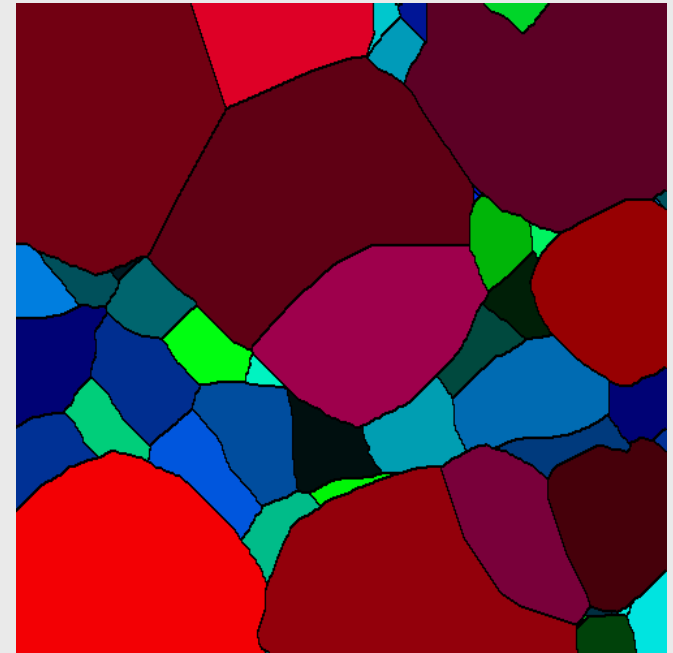
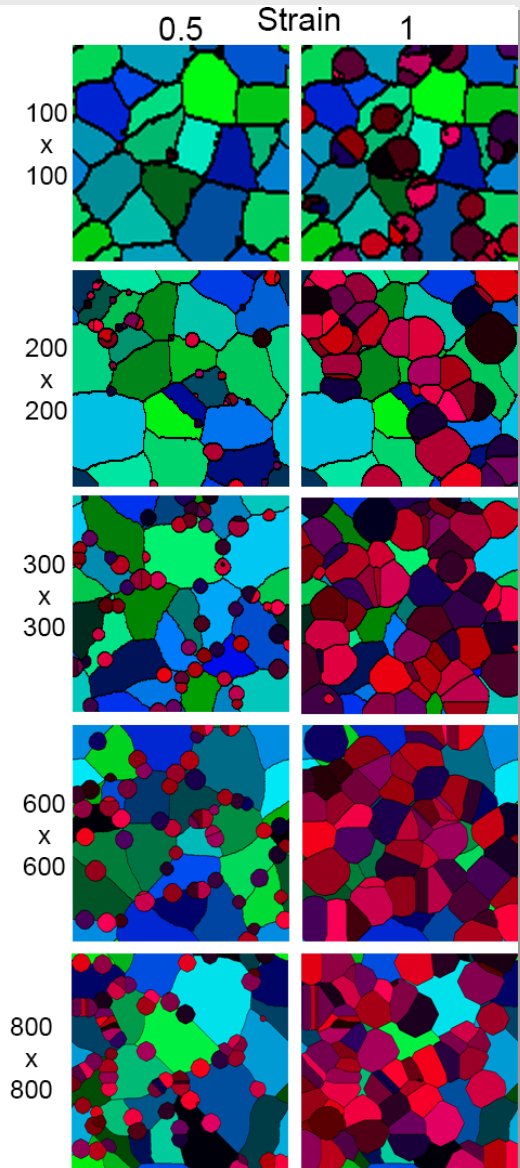
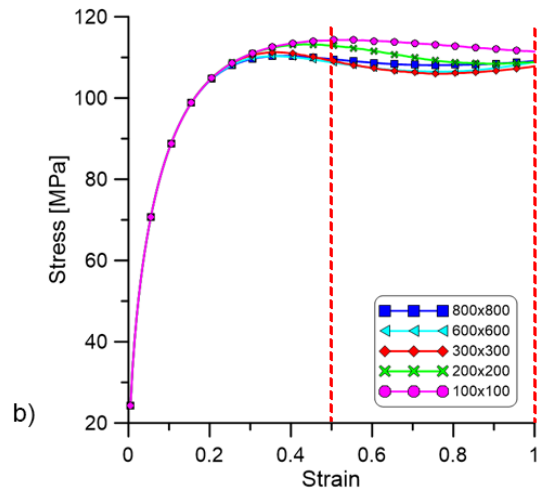
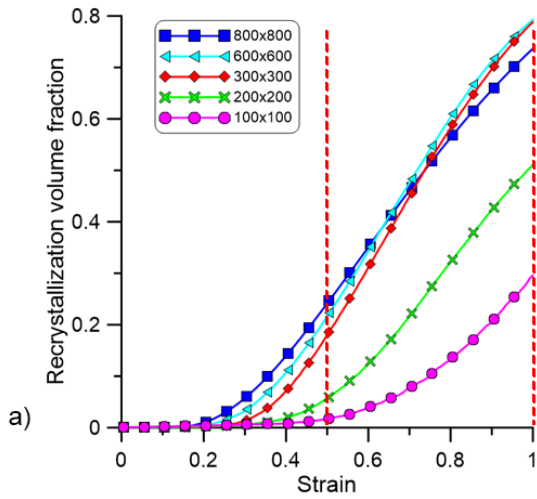
Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy



M
I
K
R
O
S
T
R
U
K
T
U
R
A





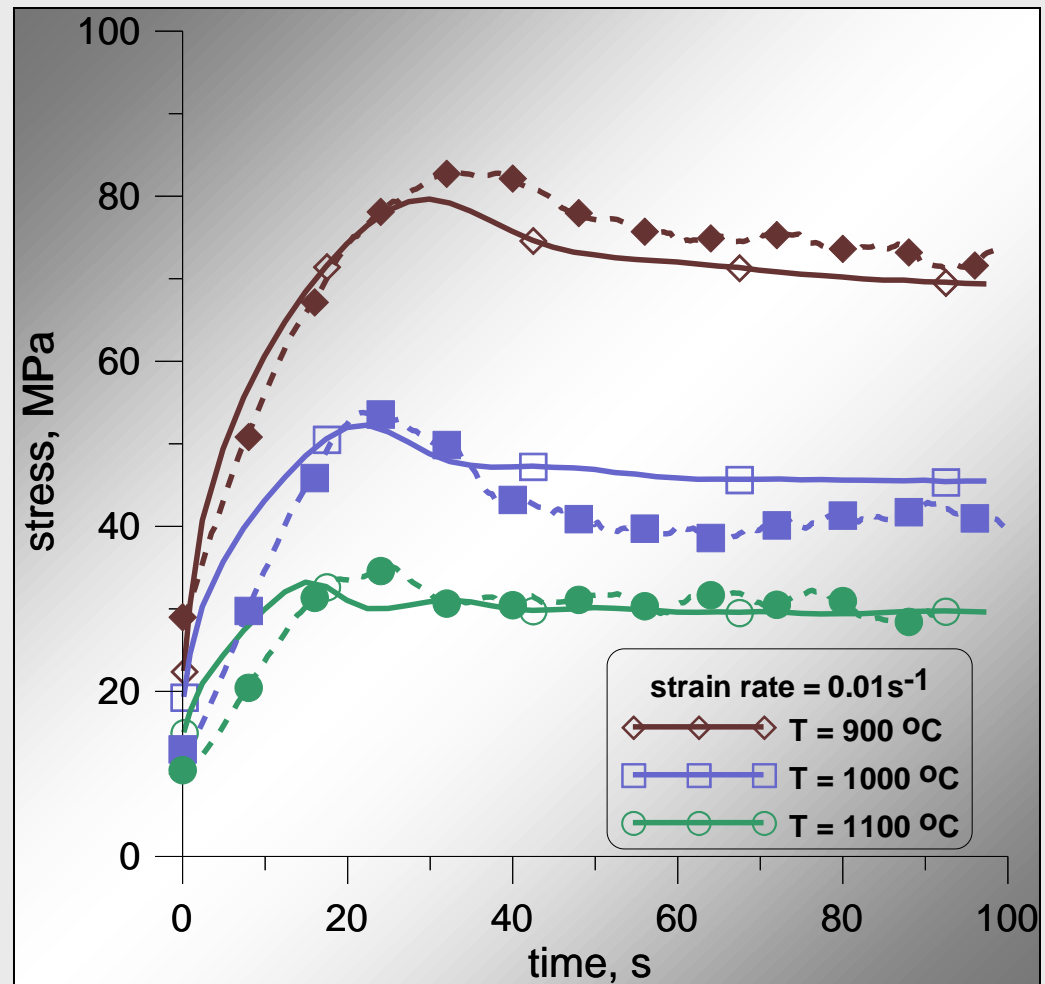


Model rekrytalizacji

Model rekrytalizacji dynamicznej - automat komórkowy

—————
doświadczenie

.....
Obliczenia CA

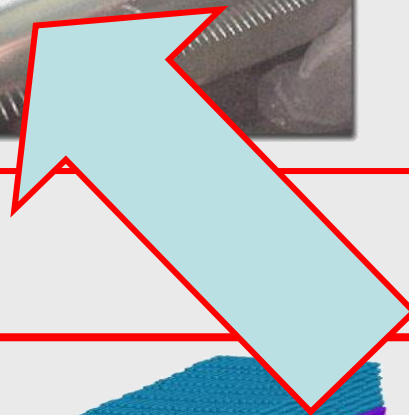
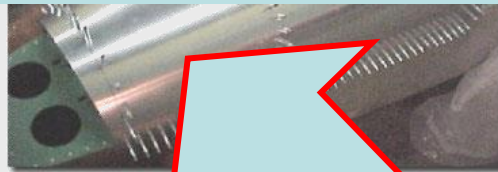
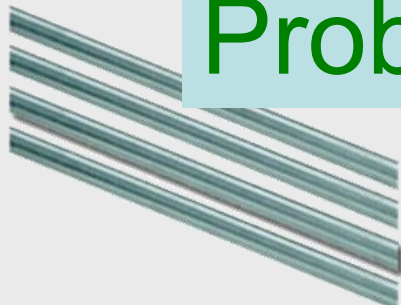
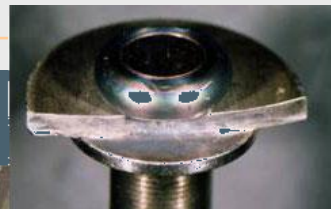
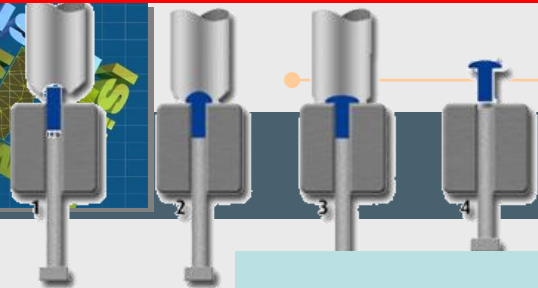




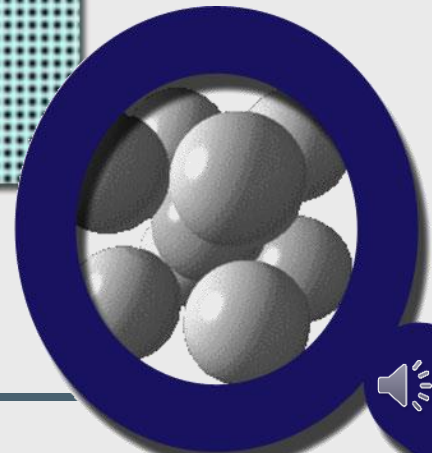
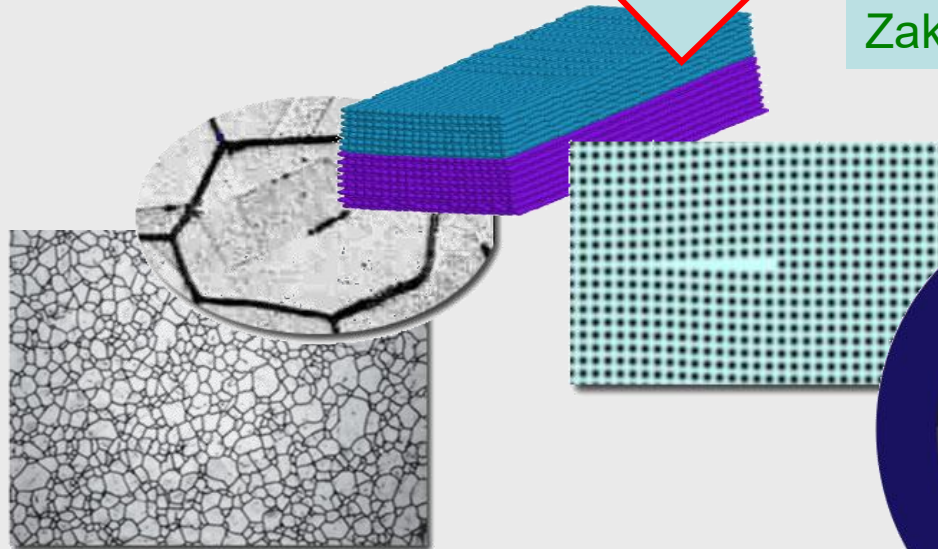
Pewne ograniczenia



Problemy przemysłowe



Zakres działania CA

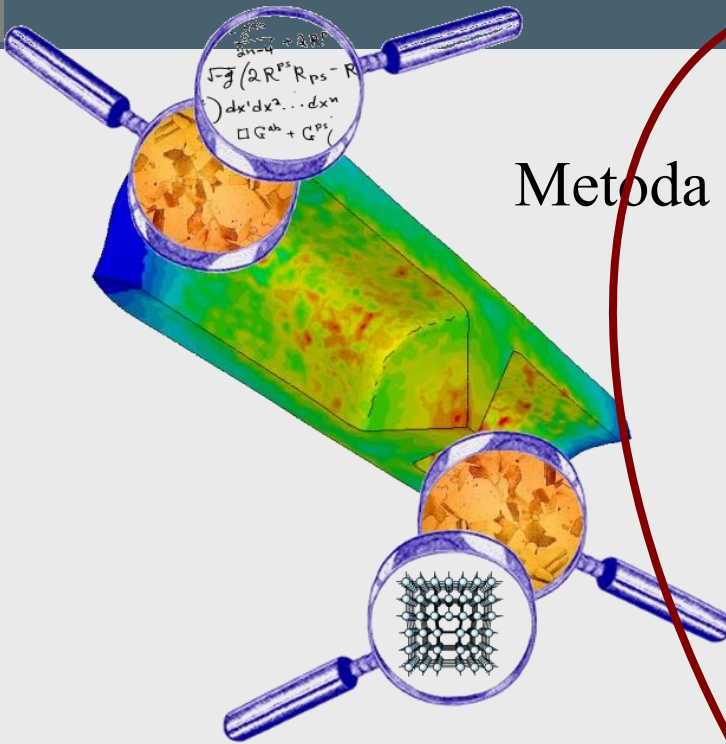




Do modelowania zjawisk w skali makro wykorzystuje się metodę elementów skończonych **FE** (*Finite Element*), która dostarcza informacje o stanie materiału w trakcie odkształcenia.

W wyniku połączenia dwóch technik obliczeniowych: metody **CA** oraz **FE**, stworzono metodę **CAFE** umożliwiającą wieloskalową analizę rozpatrywanego zagadnienia.





Metoda Elementów Skończonych

Metody analizy mikro

Konwencjonalne
Równania różniczkowe

Alternatywne
Metody dyskretne – CA, MD





Tworzenie modelu CAFE

Zdefiniowanie przestrzeni automatów komórkowych –
modelowany obszar materiału

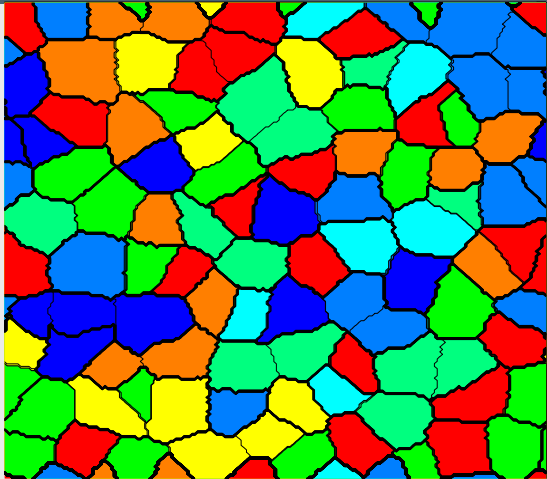
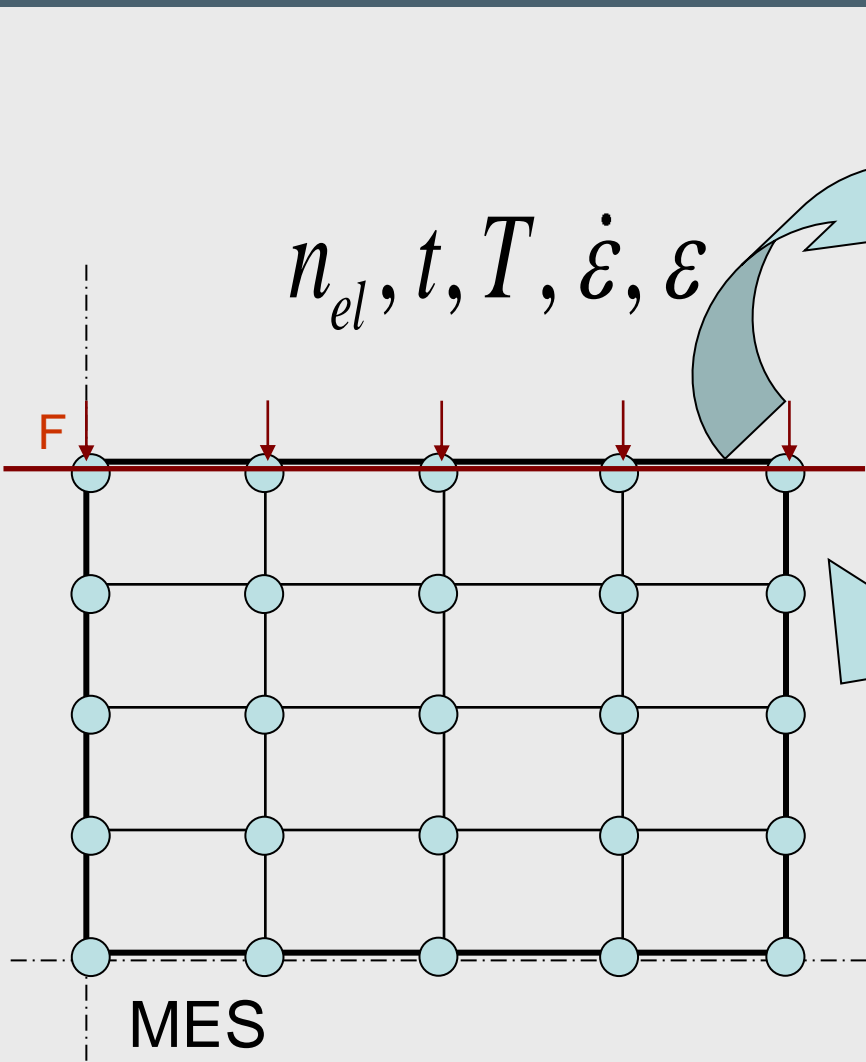
Określenie sąsiedztwa – sąsiadów z którymi graniczy każda
komórka

Zdefiniowanie zmiennych wewnętrznych, które opisują komórkę

!!! Stworzenie bazy wiedzy – zdefiniowanie reguł przejścia !!!

Połączenie przestrzeni automatów komórkowych z elementami
skończonymi





CA

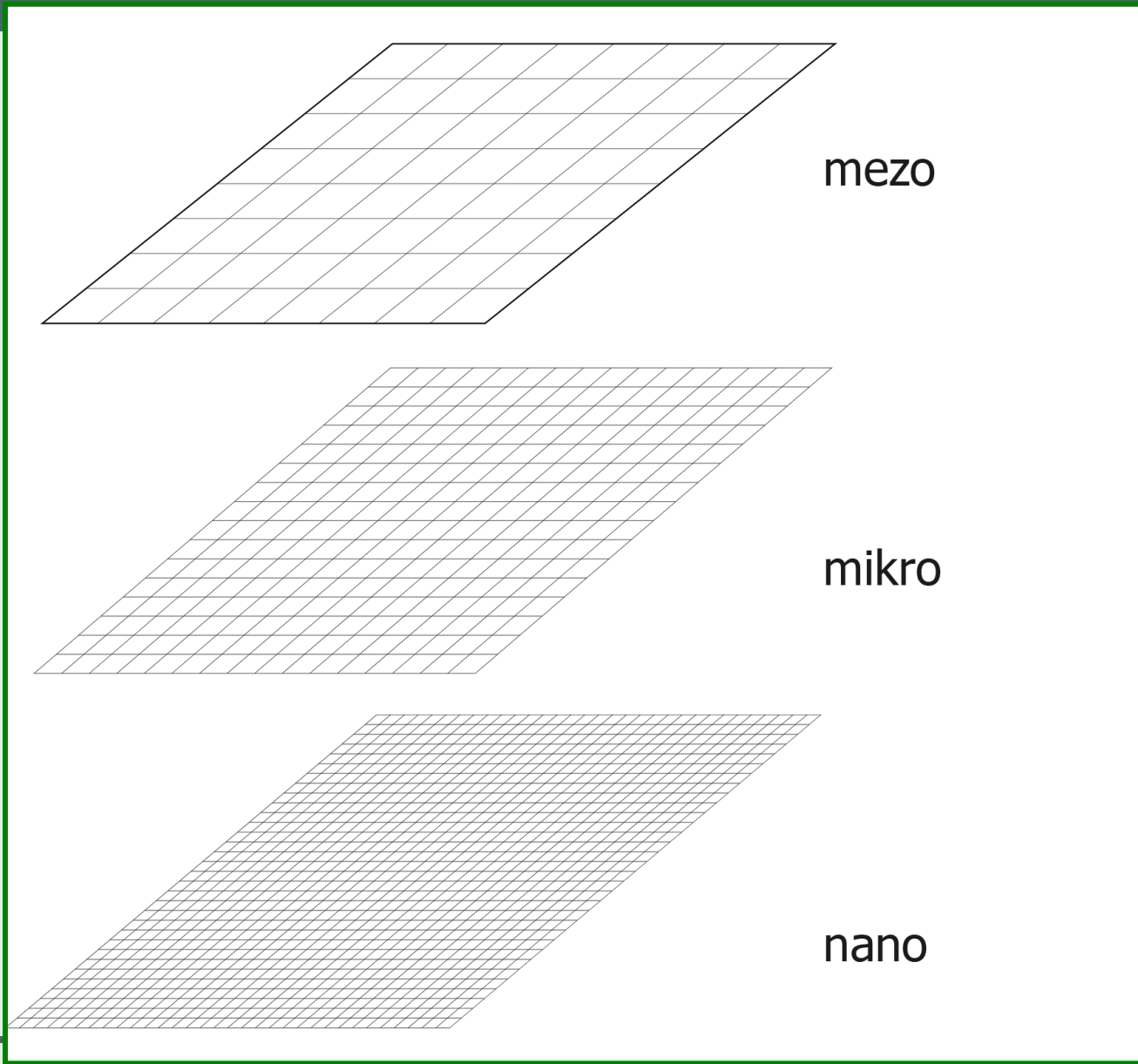
Możliwości:
 analiza cech mikrostruktury w
 całej siatce MES





Problem wielu przestrzeni CA w modelu CAFE







Problem przebudowy siatki MES w modelach typu CAFE





Remeshing jest nieodzowny przy modelowaniu złożonych procesów plastycznej przeróbki metali takich jak na przykład walcowanie lub wyciskanie.

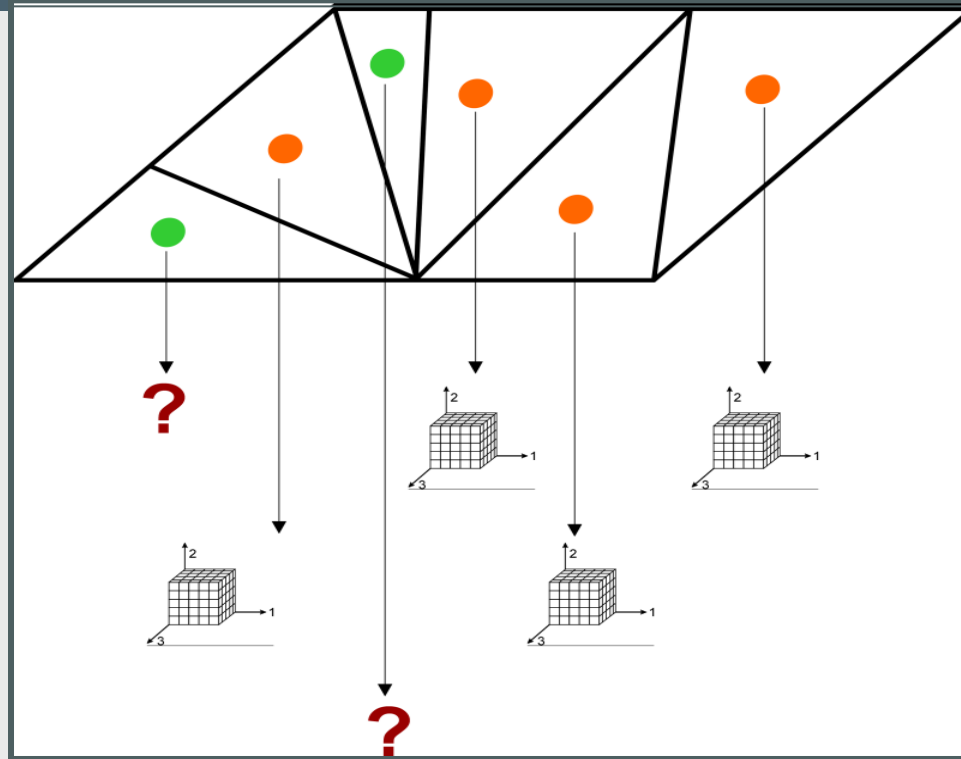
Obecnie trwają prace nad stworzeniem zaawansowanych kodów opartych o metody hp, które dedykowane są uzyskiwaniu dokładnych wyników poprzez odpowiednie zagęszczanie siatki elementów skończonych.

Brak możliwości przeprowadzenia remeshingu w trakcie procesu jest czynnikiem ograniczającym rozwijany model analizy wieloskalowej.



FE

CA



Liczba punktów CA pozostaje stała w trakcie symulacji.

Liczba punktów FE po remeshingu ulega zmianie.

Wymiana informacji pomiędzy punktami FE i punktami CA następuje z wykorzystaniem jednej z metod bez siatkowych – metody SPH (Smoothed Particle Hydrodynamic).



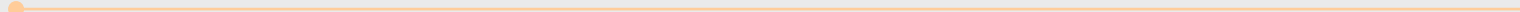
Idea metody CAFE, oparta jest na połączeniu każdego punktu całkowania Gaussa z przestrzenią automatów komórkowych CA.

Informacja z każdego punktu w mikro skali przekazywana jest do makro skali poprzez odpowiednio zdefiniowane funkcje mapujące opisane w poprzednim rozdziale.

W przypadku, gdy w siatce MES pojawiają się nowe elementy skończone nie są one połączone z przestrzeniami CA i informacja ze skali mikro nie jest przekazywana do skali makro, co uniemożliwia obliczenia.

Metoda Automatów Komórkowych oparta jest na informacji z poprzedniego kroku czasowego, co pozwala na uwzględnienie historii odkształcenia. Zatem połączenie z punktami Gaussa nowych przestrzeni automatów komórkowych doprowadzi do błędnych wyników.





Rozwiązanie:

Wprowadzenie alternatywnego zbioru punktów CA w obszarze próbki.

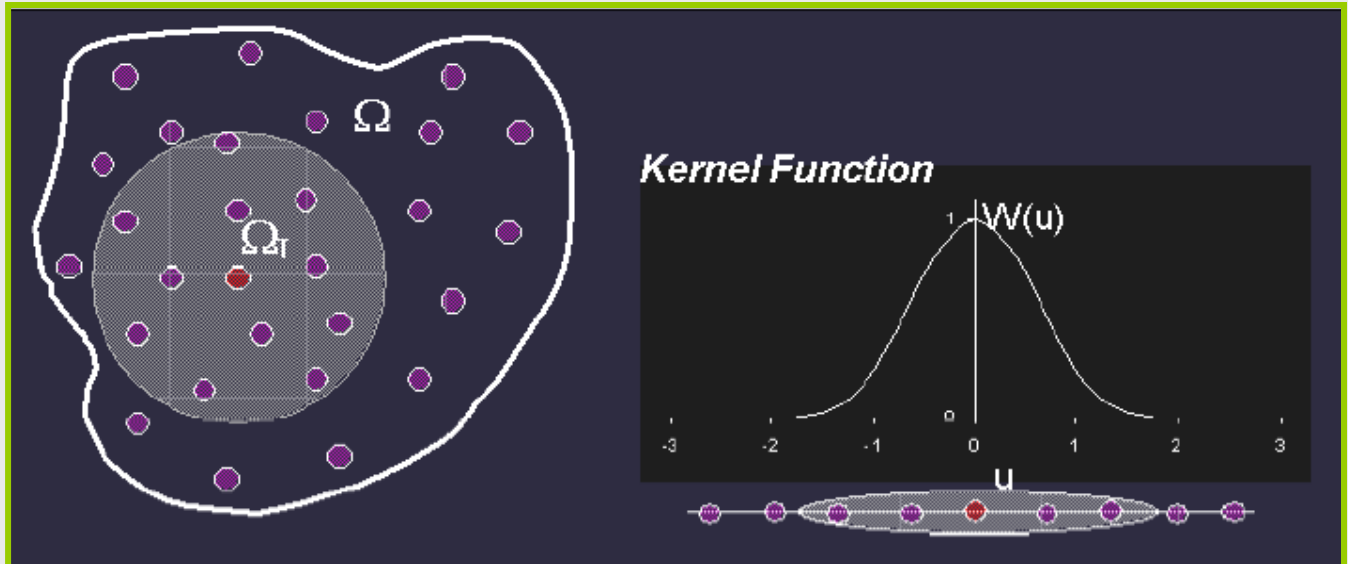
Liczba punktów CA w trakcie odkształcenia pozostaje stała niezależnie od prowadzonego procesu zagęszczania siatki MES.

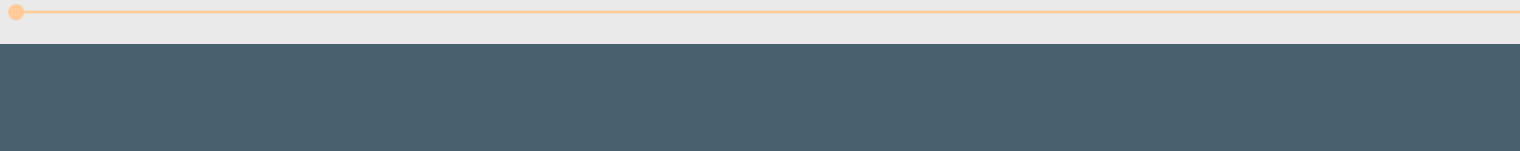
Przestrzeń CA w modelu połączono z punktami CA, a przekazywanie informacji pomiędzy punktami CA i punktami Gaussa odbywa się z wykorzystaniem procedur jednej z metod bezsiatkowych, metody SPH – Smoothed Particle Hydrodynamic



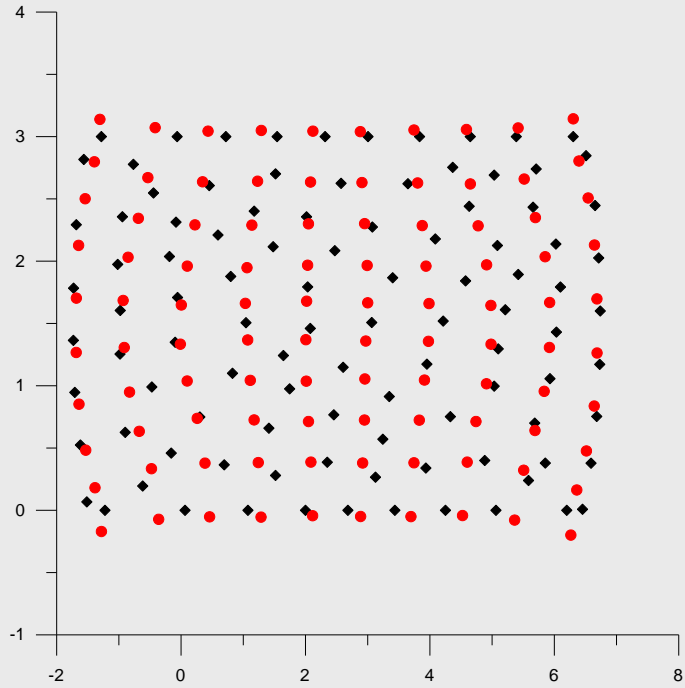
$$\langle f(x) \rangle \cong \sum_{j=1}^N f(x_j) W_{ij}(x - x_j, h) V_j$$

gdzie: $\langle \rangle$ - aproksymacja, W_{ij} – funkcja kernel, h – szerokość sąsiedztwa (smoothing length), V_j – ułamek objętości związany z j -tym punktem.





smoothing length = 0.5



smoothing length = 0.2

