

METRO

MEtalurgiczny TRening *On-line*



Makroskopowe modele numeryczne procesów transportu

Metody objętości kontrolnych i elementów skończonych w obliczeniach dyfuzyjnego krzepnięcia stopów binarnych

Jerzy Banaszek

ITC PW



Edukacja i Kultura



Rola symulacji komputerowej w technologii odlewniczej



- Potrzeba efektywnego narzędzia obliczeniowego w celu ograniczenia testów laboratoryjnych i prototypowania w technologii odlewniczej
- **Wyzwanie:** złożone wieloskalowe, wielofazowe i wzajemnie sprzężone procesy
- Obliczenia w skali mikroskopowej dziś nie w pełni możliwe ze względu na wymagania sprzętowe
- **Rozwiązanie:** makroskopowe modele symulacji komputerowej z wprzęgniętymi informacjami o rozwijających się mikro-strukturach



Co to jest makroskopowa symulacja komputerowa?



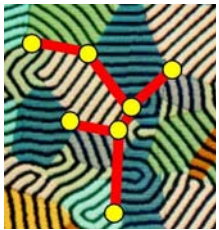
- Techniki uśrednień objętościowych lub statystycznych dla powiązania opisu makroskopowego z mikroskopowymi procesami transportu
- Dwa modele symulacyjne:
 - **dwu-obszarowy** – ruchoma siatka, śledzenie frontu, model właściwy dla wyraźnie wyróżnionej powierzchni fazowej
 - **jedno-obszarowy** – stała siatka, model właściwy dla wieloskładnikowych układów bez ostrego frontu fazowego



Metoda jedno-obszarowa – rozsądny wybór



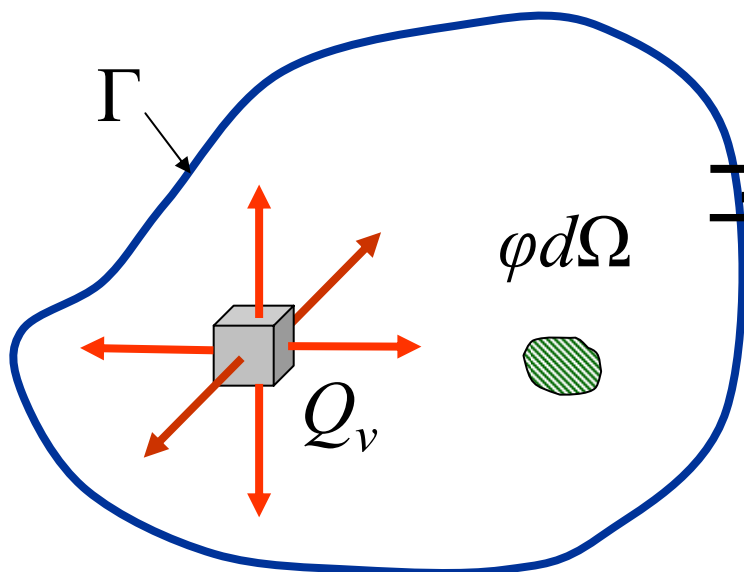
- Pojedynczy zbiór równań zachowania masy, pędu energii i składnika rozpuszczonego obowiązujący w całym rozważanym obszarze
- Stała siatka podziału przestrzennego, nie ma potrzeby śledzenia frontu
- Obliczeniowa efektywność – umiarkowane wymagania sprzętowe
- Satysfakcjonująca reprezentacja dendrytycznego krzepnięcia kolumnowego i równo-osowego przy poprawnym sprzężeniu z mikroskopowymi procesami transportu



Zasada zachowania skalarnej wielkości polowej



Forma całkowa



$$\vec{f} \cdot \vec{n}$$

Ω - objętość
 Γ - powierzchnia brzegowa

$\varphi = \frac{\Phi}{\Omega}$ - gęstość wielkości skalarnej

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{f} \cdot \vec{n} d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$



Zasada zachowania skalarnej wielkości polowej



$$\bar{f} = \bar{f}_{conv.} + \bar{f}_{dyf.}$$

Strumień konwekcyjny

$$\bar{f}_{conv.} = \bar{v} \varphi; \quad \bar{v} = (v_1, v_2, v_3) \text{ - wektor prędkości}$$

Strumień dyfuzyjny – prawo Ficka

$$\bar{f}_{dyf.} = -\chi \nabla \varphi; \quad \chi \text{ - dyfuzyjność}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega + \int_{\Gamma} (\bar{v} \varphi - \chi \nabla \varphi) \bar{n} d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$



Zasada zachowania skalarnej wielkości polowej



Reguła sumacyjna Einsteina

$$\sum_{j=1}^n A_j \varphi_j = A_j \varphi_j \quad \text{dla } j = 1, 2, \dots, n$$

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} \varphi_j = A_{ij} \varphi_j \quad \text{dla } i = \text{const}$$

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \frac{\partial v_j}{\partial x_j}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega + \oint_{\Gamma} \left(v_j \varphi - \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) n_j d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$



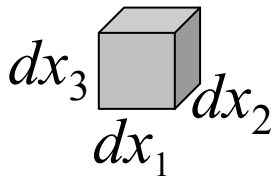
Zasada zachowania skalarnej wielkości polowej



Forma różniczkowa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega + \oint_{\Gamma} \left(v_j \varphi - \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) n_j d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$

objętość różniczkowa



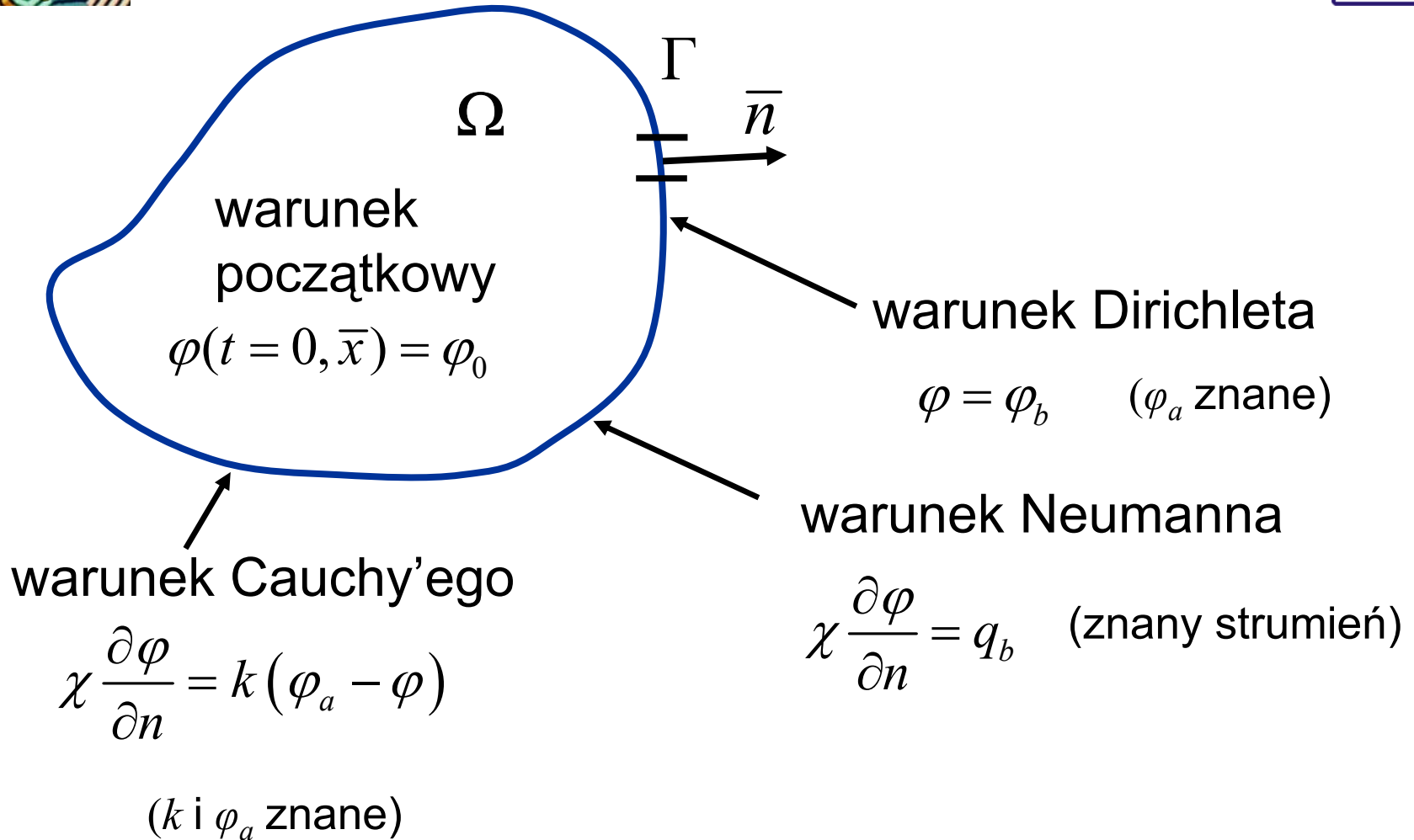
twierdzenie Gaussa o dywergencji

$$\oint_{\Gamma} \bar{f} \bar{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \frac{\partial f_j}{\partial x_j} d\Omega$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v_j \varphi - \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) = Q_v$$



Warunki początkowe i brzegowe





Dyfuzyjny transport skalara



$$v_j = 0$$

Forma całkowa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega - \int_{\Gamma} \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} n_j d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$

Forma różniczkowa

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) = Q_v$$



Współczesne metody dyskretyzacji przestrzennej



- Różnicowa metoda objętości kontrolnych (Metoda Bilansów Elementarnych - MBE) oparta na całkowym równaniu zachowania

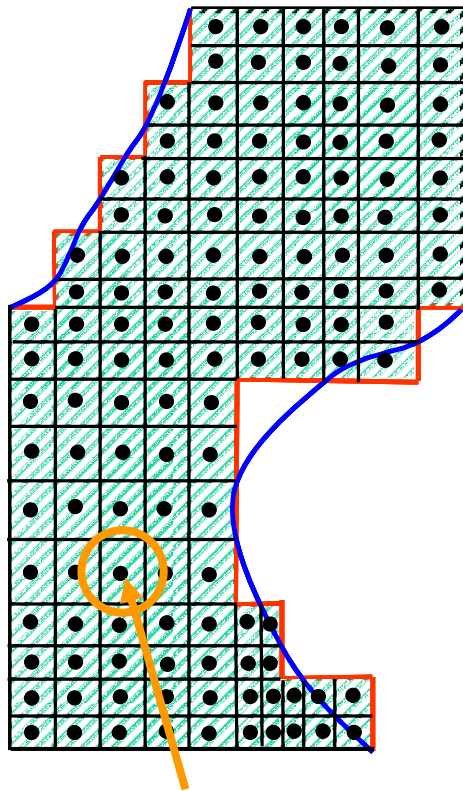
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\Omega - \oint_{\Gamma} \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} n_j d\Gamma = \int_{\Omega} Q_v d\Omega$$

- Metoda Elementów Skończonych (MES) oparta na różniczkowym równaniu zachowania

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) = Q_v$$



Procedura przestrzennego podziału w metodzie MBE



**objętość kontrolna
i jej węzeł**

- Podział obszaru na podobszary bilansowe – objętości kontrolne
- Węzły w środkach objętości kontrolnych reprezentujące uśrednione własności podobszaru bilansowego
- Całkowy bilans wielkości skalarnej w objętości kontrolnej



Zalety metody MBE



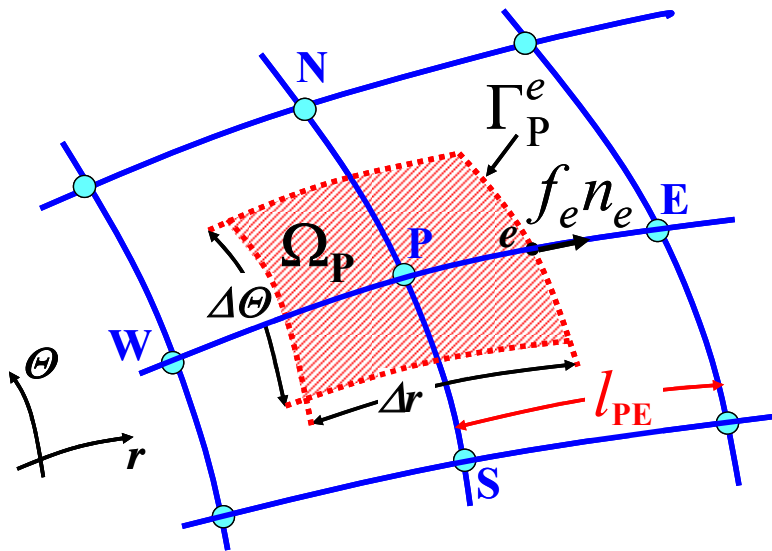
- Zapewnia spełnienie zasady zachowania wielkości polowej w objętości kontrolnej i w całym obszarze - **lokalna i globalna zachowawczość** modelu dyskretnego
- Charakteryzuje się prostotą opisu, bez zaawansowanej matematyki – przekonująca dla inżynierów
- Umożliwia bezpośrednią interpretację fizyczną równań modelu



Podstawowe założenia metody MBE



1. Zastąpienie przestrzennych pochodnych ilorazami różnicowymi



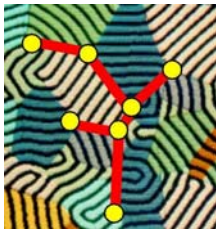
Przykład:

strumień dyfuzyjny na wschodniej granicy objętości kontrolnej

$$f_e n_e = -\chi_e \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} n_j \cong -\chi_e \frac{\varphi_E - \varphi_P}{l_{PE}} n_e$$

przy $n_e = 1$

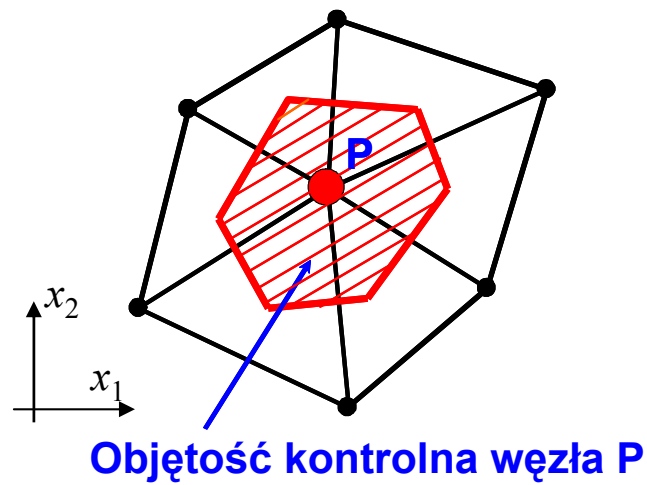
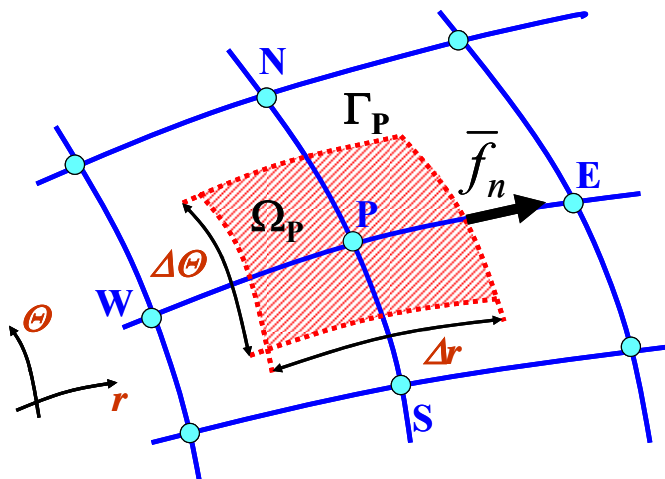
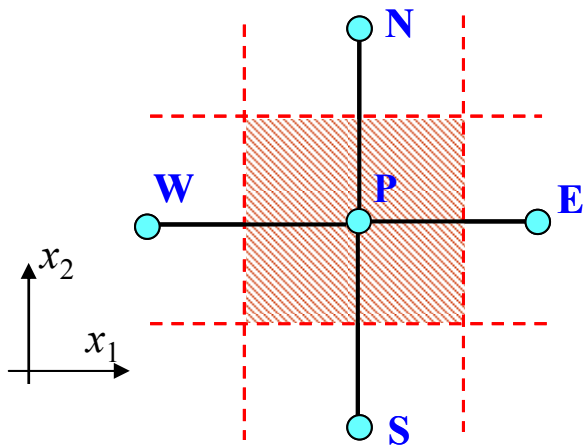
MBE – różnicowa metoda objętości kontrolnych (CVFDM)



Podstawowe założenia metody MBE



2. Fragmenty brzegu objętości kontrolnej ortogonalne do linii siatki

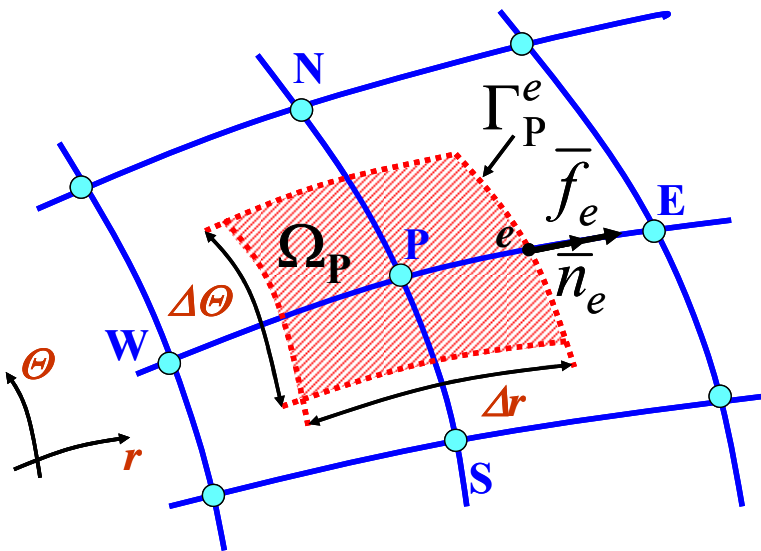




Podstawowe założenia metody MBE



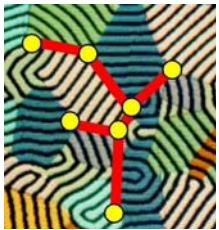
3. Uśrednione własności wewnątrz i na brzegach objętości kontrolnej



$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_P} \varphi d\Omega \cong \Omega_P \frac{d\varphi_P}{dt}$$

$$\int_{\Omega_P} Q_v d\Omega \cong (Q_v)_P \Omega_P$$

$$\int_{\Gamma_P^e} f_j n_j d\Gamma \cong f_e n_e \Gamma_P^e$$

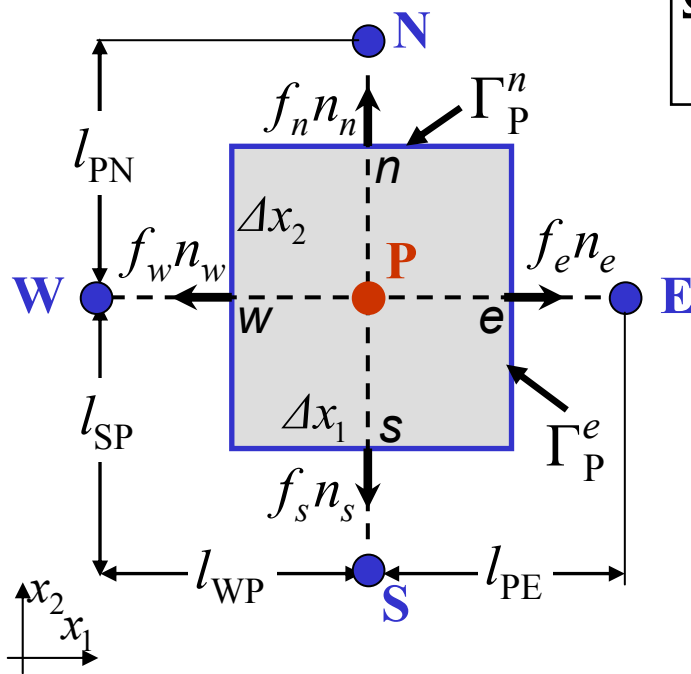


MBE – bilans skalarą dla wewnętrznej objętości kontrolnej



Bilans skalarą φ w 2D objętości kontrolnej

$$\Omega_P \frac{d\varphi_P}{dt} + \sum_{i=e,n,w,s} f_i n_i \Gamma_P^i = (Q_v)_P \Omega_P$$



gdzie

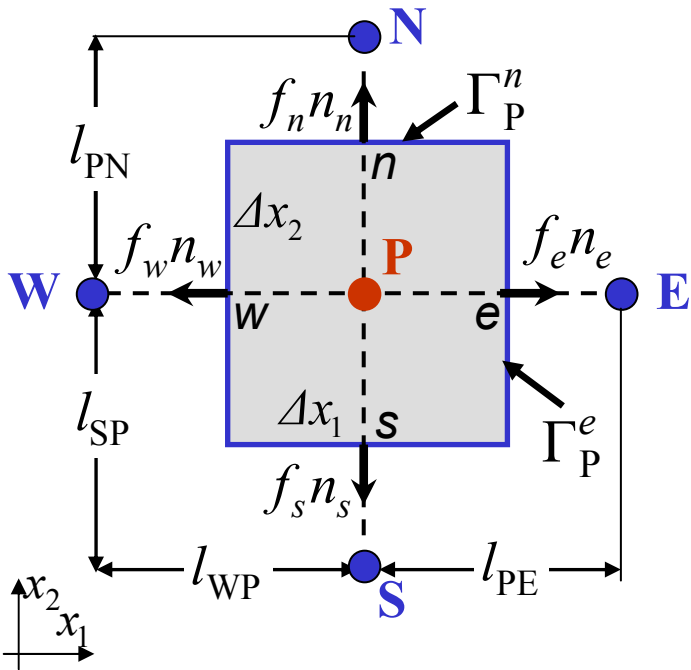
$$\begin{cases} \Omega_P = \Delta x_1 \Delta x_2 \cdot (1) \\ \Gamma_P^i = \Delta x_i \cdot (1) \\ n_i = \pm 1 \end{cases}$$



MBE – bilans skalarą dla wewnętrznej objętości kontrolnej



Bilans skalarą φ w 2D objętości kontrolnej



$$\Delta x_1 \Delta x_2 \frac{d\varphi_P}{dt} - \chi_e \frac{\varphi_E - \varphi_P}{l_{PE}} \Delta x_2 (1) +$$

$$\chi_w \frac{\varphi_P - \varphi_W}{l_{WP}} \Delta x_2 (-1) + \chi_n \frac{\varphi_N - \varphi_P}{l_{PN}} \Delta x_1 (1)$$

$$+ \chi_s \frac{\varphi_P - \varphi_S}{l_{SP}} \Delta x_1 (-1) = \Delta x_1 \Delta x_2 (Q_v)_P$$

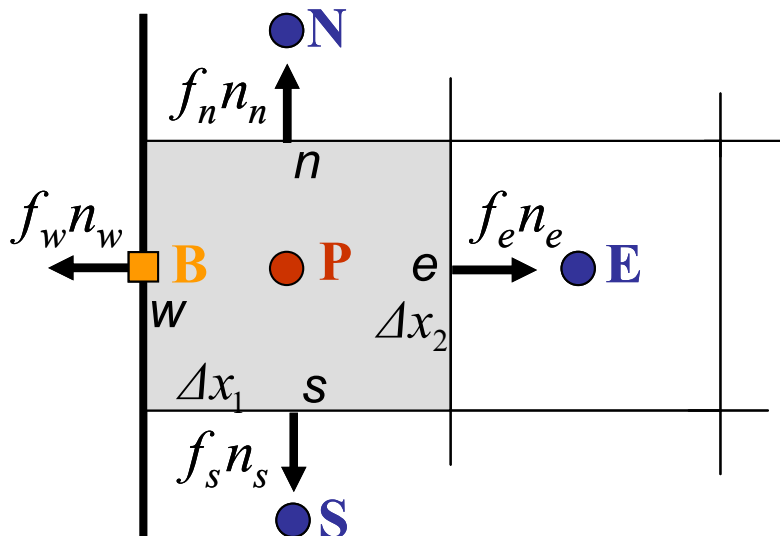


MBE – bilans skalarą dla brzegowej objętości kontrolnej



Przykład: Objętość kontrolna sąsiadująca
z ‘zachodnią’ powierzchnią brzegową obszaru

$$\Delta x_1 \Delta x_2 \frac{d\varphi_P}{dt} + \sum_{i=e,n,s} f_i n_i \Delta x_i + f_w n_w \Delta x_2 = \Delta x_1 \Delta x_2 (Q_v)_P$$



gdzie

$$f_w n_w = \chi_w \frac{\varphi_P - \varphi_B}{\Delta x_1 / 2} (-1) = k(\varphi_a - \varphi_B) + q_b$$



MBE – warunki brzegowe

Ogólny zapis dla wszystkich typów warunków brzegowych:

$$f_w n_w = \chi_w \frac{\varphi_P - \varphi_B}{\Delta x_1 / 2} (-1) = k(\varphi_a - \varphi_B) + q_b$$

1. warunek Dirichleta – dana wartość skalara

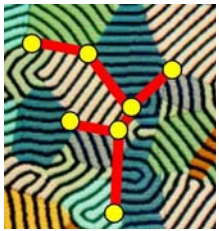
$$k = \text{huge value}; \quad q_b = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_B = \varphi_a$$

2. warunek Neumanna – zadany strumień

$$k = 0; \quad q_b = 0 \text{ (brzeg adiabatyczny) lub } q_b \neq 0$$

3. warunek Cauchy'ego - mieszany

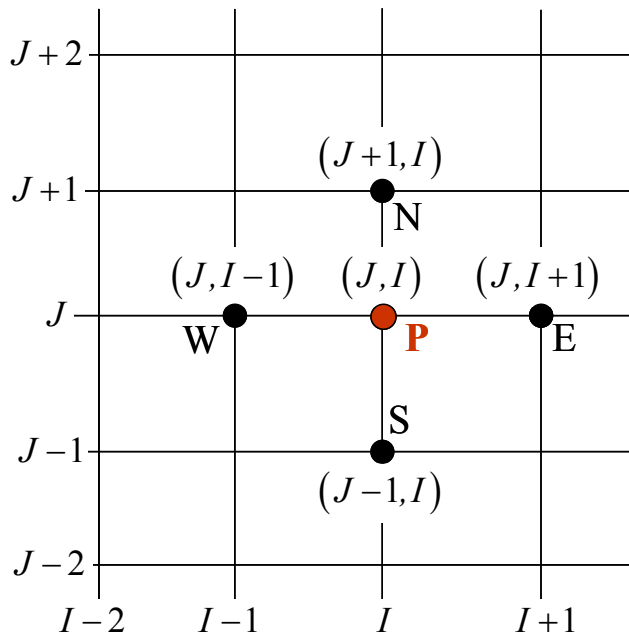
$$k > 0; \quad q_v = 0; \quad \varphi_b - \text{dane}$$



MBE – dwu-indeksowa notacja



Notacja indeksowa
węzłów siatki



Bilans skalara φ

$$\Delta x_1 \Delta x_2 \frac{d\varphi_{J,I}}{dt} - \chi_e \frac{\varphi_{J,I+1} - \varphi_{J,I}}{l_{PE}} \Delta x_2 (1) +$$

$$\chi_w \frac{\varphi_{J,I} - \varphi_{J,I-1}}{l_{WP}} \Delta x_2 (-1) + \chi_n \frac{\varphi_{J+1,I} - \varphi_{J,I}}{l_{PN}} \Delta x_1 (1)$$

$$+ \chi_s \frac{\varphi_{J,I} - \varphi_{J-1,I}}{l_{SP}} \Delta x_1 (-1) = \Delta x_1 \Delta x_2 (Q_v)_P$$

lub po prostych przekształceniach

$$C_{J,I} \frac{d\varphi_{J,I}}{dt} + K_{J-1,I} \varphi_{J-1,I} + K_{J,I-1} \varphi_{J,I-1} +$$

$$K_{J,I} \varphi_{J,I} + K_{J,I+1} \varphi_{J,I+1} + K_{J+1,I} \varphi_{J+1,I} = R_{J,I}$$



MBE – zapis macierzowy

$$[\mathbf{C}] \left\{ \frac{d\varphi(t)}{dt} \right\} + [\mathbf{K}] \{ \varphi(t) \} = \{ \mathbf{R} \}$$

gdzie: $C_{J,I} = \Delta x_1 \Delta x_2$ wyrazy **Macierzy Pojemności**

$$K_{J-1,I} = -\chi_s \frac{\Delta x_1}{l_{SP}}; K_{J,I-1} = -\chi_w \frac{\Delta x_2}{l_{WP}}$$

$$K_{J,I+1} = -\chi_e \frac{\Delta x_2}{l_{PE}}; K_{J+1,I} = -\chi_n \frac{\Delta x_1}{l_{PN}}$$

$$K_{J,I} = -\left(K_{J-1,I} + K_{J,I-1} + K_{J,I+1} + K_{J+1,I} \right)$$

$$R_{J,I} = \Delta x_1 \Delta x_2 (Q_v)_p \quad \text{składowe wektora prawych stron}$$

$\{ \dots \}$ – macierz kolumnowa wartości węzłowych

wyrazy
Macierzy Dyfuzji



MES – efektywne narzędzie obliczeń inżynierskich



- Podstawowa idea – obszar rozwiązania modelowany przez zbiór dyskretnych elementów
- Elementy łączone na różne sposoby – złożone kształty geometryczne mogą być precyzyjnie reprezentowane
- Kształty geometryczne elementu i zmiany wielkości polowej w jego obszarze interpolowane wielomianami zdefiniowanymi w lokalnych bazach
- Łączenie rozwiązań w poszczególnych elementach dla uzyskania reprezentacji dyskretnej całego problemu



Metoda Reszt Ważonych (MRW) – podstawa MES



Punkt startowy:

- Operator różniczkowy transportu dyfuzyjnego

$$\mathbf{A}(\varphi_{ex.}) = \frac{\partial \varphi_{ex.}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi_{ex.}}{\partial x_j} \right) - Q_v = 0$$

- Operator różniczkowy warunków brzegowych

$$\mathbf{B}(\varphi_{ex.}) = \chi \frac{\partial \varphi_{ex.}}{\partial n} - k(\varphi_a - \varphi_{ex.}) - q_b = 0$$

gdzie $\varphi_{ex.}$ – dokładne rozwiązanie dla skalarnej wielkości polowej φ



Metoda Reszt Ważonych (MRW) – podstawa MES



Rezidua (błędy rozwiązania przybliżonego)

- Założona przestrzenna aproksymacja φ_{ex} .

$$\varphi_{ex.}(x_1, x_2, x_3, t) \approx \varphi(x_1, x_2, x_3, t)$$

- Rezidua operatorów **A** i **B**

$$\mathbf{REZ}_A = \mathbf{A}(\varphi) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) - Q_v \neq 0$$

$$\mathbf{REZ}_B = \mathbf{B}(\varphi) = \chi \frac{\partial \varphi}{\partial n} - k(\varphi_a - \varphi) - q_b \neq 0$$



Metoda Reszt Ważonych – sformułowanie całkowe



Przestrzenne ważenie reziduw

$$\int_{\Omega} W_k \mathbf{REZ}_A d\Omega + \int_{\Gamma} W_k \mathbf{REZ}_B d\Gamma = 0$$

gdzie $W_k(x_1, x_2, x_3)$ – założone *funkcje wagowe*, $k = 1, 2, \dots, N$

$$\int_{\Omega} W_k \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) - Q_v \right) d\Omega +$$
$$\int_{\Gamma} W_k \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial n} - k (\varphi_a - \varphi) - q_b \right) d\Gamma = 0$$



Metoda Reszt Ważonych – sformułowanie ‘słabe’



- Tożsamość Greena

$$\int_{\Omega} W_k \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(W_k \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial W_k}{\partial x_j} \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} d\Omega$$

- Twierdzenie Gaussa – Greena o dywergencji

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(W_k \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) d\Omega = \oint_{\Gamma} W_k \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} n_j d\Gamma$$



Metoda Reszt Ważonych – sformułowanie ‘słabe’



‘Słaba’ postać sformułowania MRW

$$\int_{\Omega} W_k \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial W_k}{\partial x_j} \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} d\Omega =$$
$$\int_{\Gamma} W_k (k(\varphi_a - \varphi) + q_b) d\Gamma + \int_{\Omega} W_k Q_v d\Omega$$

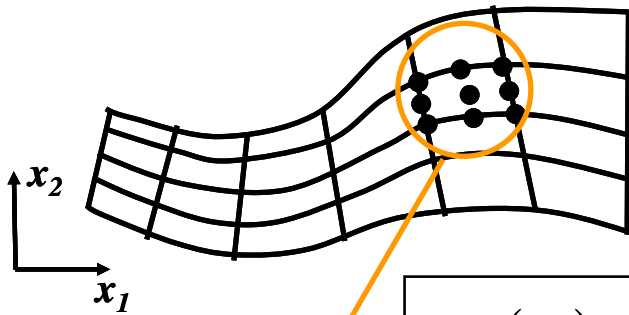
for $k = 1, 2, \dots, N$



MES – ‘odcinkowa’ interpolacja przestrzenna



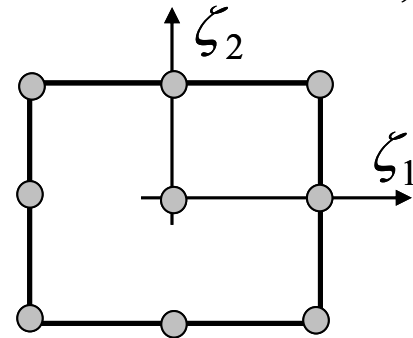
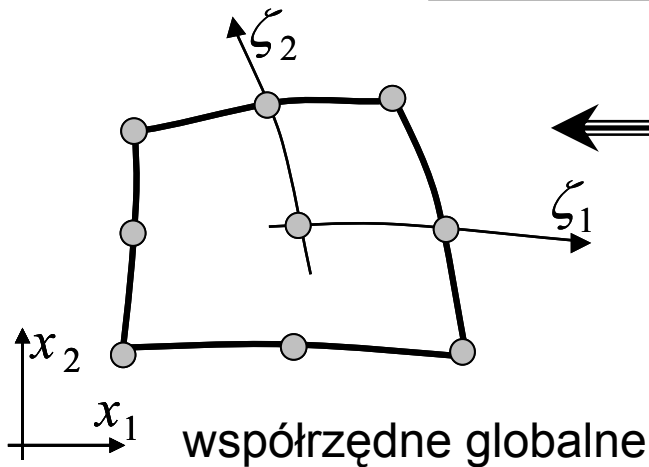
Aproksymacja geometrii obszaru elementami skończonymi



$$\Omega = \sum_{e=1}^{NE} \Omega_e$$

$$x_i(\zeta) = N_k(\zeta)(x_i)_k$$

gdzie: $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2)$
 $i = 1, 2; k = 1, 2, \dots, N_g$



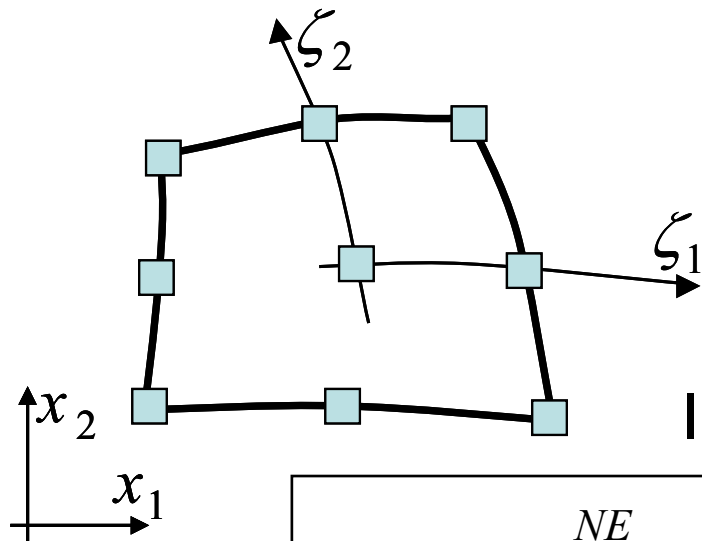
współrzędne lokalne



MES – ‘odcinkowa’ interpolacja przestrzenna



Interpolacja skalarnej wielkości polowej na siatce elementów skończonych



Interpolacja w elemencie ‘e’

$$\varphi^{(e)}(\mathbf{x}, t) = M_k^{(e)}(\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{x}))\varphi_k(t)$$

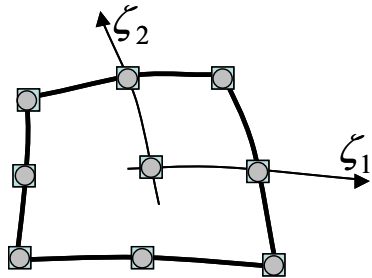
Interpolacja w całym obszarze

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \sum_{e=1}^{NE} \varphi^{(e)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{e=1}^{NE} M_k^{(e)}(\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{x}))\varphi_k(t)$$

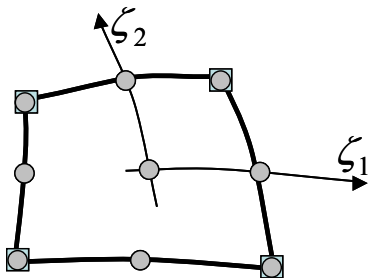
dla $k = 1, 2, \dots, N_\varphi$



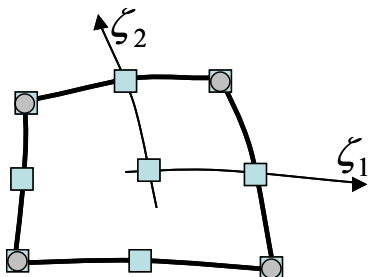
MES – idea elementów parametrycznych



Element *izo-parametryczny* – te same węzły interpolacji geometrii i skalara, identyczne funkcje M_k i N_k , oraz $N_g = N_\phi$



Element *super-parametryczny* – stopień wielomianu N_k wyższy od stopnia wielomianu M_k , oraz $N_g > N_\phi$



Element *sub-parametryczny* – stopień wielomianu N_k niższy od stopnia wielomianu M_k , oraz $N_g < N_\phi$



MES – równania węzłowe



$$\left. \begin{aligned} x_i(\zeta) &= N_m(\zeta)(x_i)_m \\ \varphi(\mathbf{x}, t) &= \sum_{e=1}^{NE} M_k^{(e)}(\zeta(\mathbf{x}))\varphi_k(t) \end{aligned} \right\} \text{ dla } \begin{cases} m = 1, 2, \dots, N_g \\ k = 1, 2, \dots, N_\varphi \end{cases}$$

$$\int_{\Omega} W_k \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial W_k}{\partial x_j} \chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma} W_k (k(\varphi_a - \varphi) + q_b) d\Gamma + \int_{\Omega} W_k Q_v d\Omega$$

$$\text{dla } k = 1, 2, \dots, N$$

MRW Bubnov-Galerkina - najlepszym przybliżeniem

$$W_k \equiv M_k; \quad N = N_\varphi$$



MES – równania węzłowe

Równania MES oparte na MRW
Bubnov-Galerkina - (**G-MES**)

$$\sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} M_m^{(e)} \frac{d\varphi_m}{dt} d\Omega + \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \frac{\partial M_k^{(e)}}{\partial x_i} \chi^{(e)} \frac{\partial M_m^{(e)}}{\partial x_i} \varphi_m d\Omega +$$

$$\sum_{eb=1}^{NE_b} \int_{\Gamma_e} k^{(eb)} M_k^{(eb)} \varphi_k d\Gamma = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} Q_v^{(e)} d\Omega +$$

$$\sum_{eb=1}^{NE_b} \int_{\Gamma_e} M_k^{(eb)} \left(k^{(eb)} \varphi_a^{(eb)} + q_b \right) d\Gamma$$

$$\text{dla } \begin{cases} i = 1, 2, 3 \\ k, m = 1, 2, \dots, N_\varphi \end{cases}$$



Zapis macierzowy równań metody G-MES



$$[\mathbf{C}] \left\{ \frac{d\varphi(t)}{dt} \right\} + [\mathbf{K}] \varphi(t) = \{\mathbf{R}\}$$

Macierz pojemności ('masy')

$$C_{km} = \sum_{e=1}^{NE} C_{km}^{(e)} = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} M_m^{(e)} d\Omega$$

CMM – Consistent 'Mass'
Matrix Model

$$C_{kk} = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} d\Omega; \quad C_{km} = 0 \quad \text{dla } m \neq k$$

LMM – Lumped 'Mass'
Matrix Model



Zapis macierzowy równań metody G-MES



$$[\mathbf{C}] \left\{ \frac{d\varphi(t)}{dt} \right\} + [\mathbf{K}] \varphi(t) = \{\mathbf{R}\}$$

Macierz Dyfuzji (symetryczna)

$$K_{km} = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \frac{\partial M_k^{(e)}}{\partial x_i} \chi^{(e)} \frac{\partial M_m^{(e)}}{\partial x_i} d\Omega + \sum_{eb=1}^{NE_b} \int_{\Gamma_e} k^{(eb)} M_k^{(eb)} d\Gamma$$

Wektor Prawych Stron

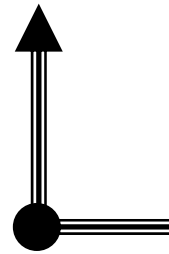
$$R_k = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} Q_v^{(e)} d\Omega + \sum_{eb=1}^{NE_b} \int_{\Gamma_e} M_k^{(eb)} \left(k^{(eb)} \varphi_a^{(eb)} + q_b \right) d\Gamma$$



Procedura całkowania w czasie

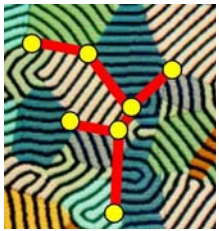
Równania **pół-dyskretnych** modeli MBE i G-MES

$$[\mathbf{C}] \left\{ \frac{d\varphi(t)}{dt} \right\} + [\mathbf{K}] \varphi(t) = \{\mathbf{R}\}$$

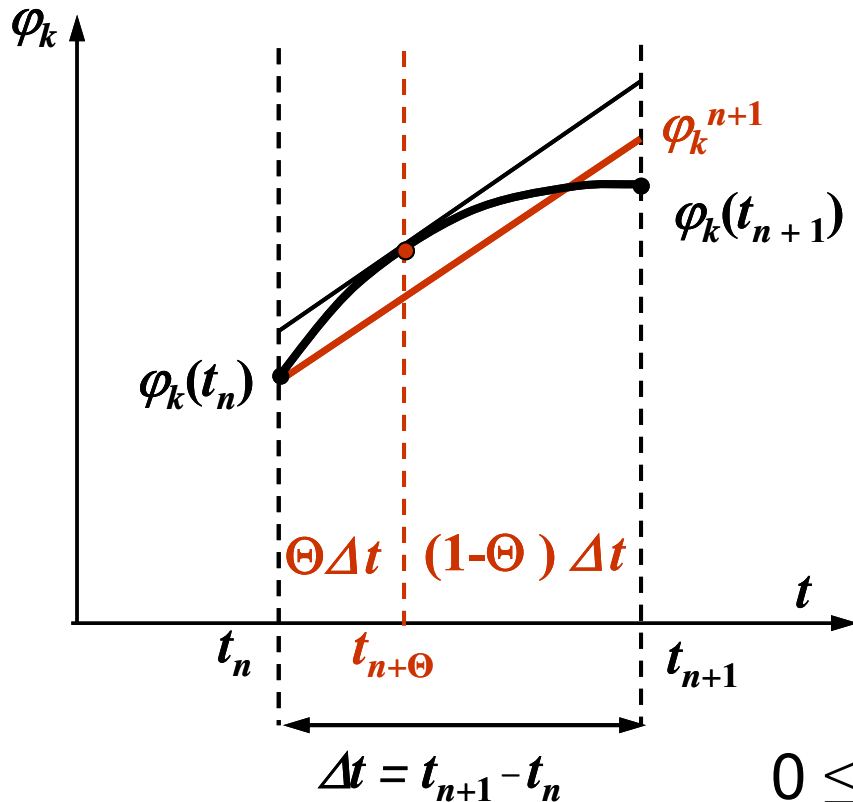


potrzeba całkowania w czasie

Cecha charakterystyczna: kroczenie do przodu
w czasie – czas ‘jednokierunkową’ współrzędną



Jawny / niejawny jednokrokowy schemat kroczenia w czasie



Rozwinięcie w szereg Taylora
– pochodna po czasie
zastąpiona ilorazem różnicowym:

$$\left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+\Theta} = \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} +$$

$$\frac{1}{2}(2\Theta - 1)\Delta t \left(\frac{d^2\varphi_k}{dt^2} \right)^{n+\Theta} + o(\Delta t^2)$$

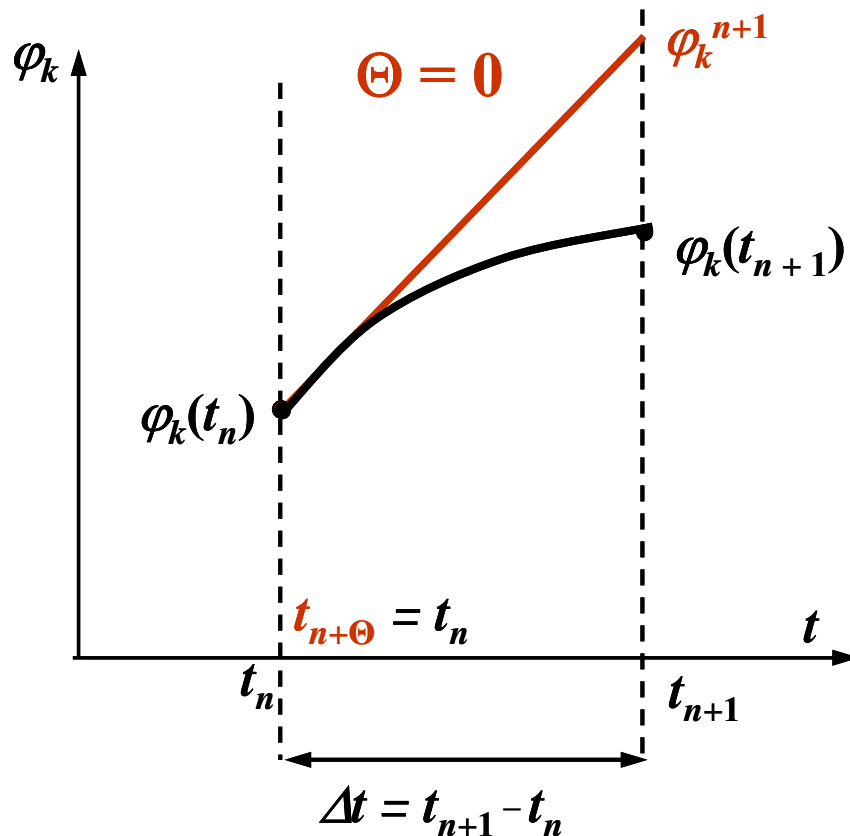
$0 \leq \Theta \leq 1$ - parameter schematu



Jawny / niejawny jednokrokowy schemat kroczenia w czasie



Jawny Schemat Eulera



$$\left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+\Theta} = \left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^n = \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + 0(\Delta t)$$

Dokładność pierwszego rzędu

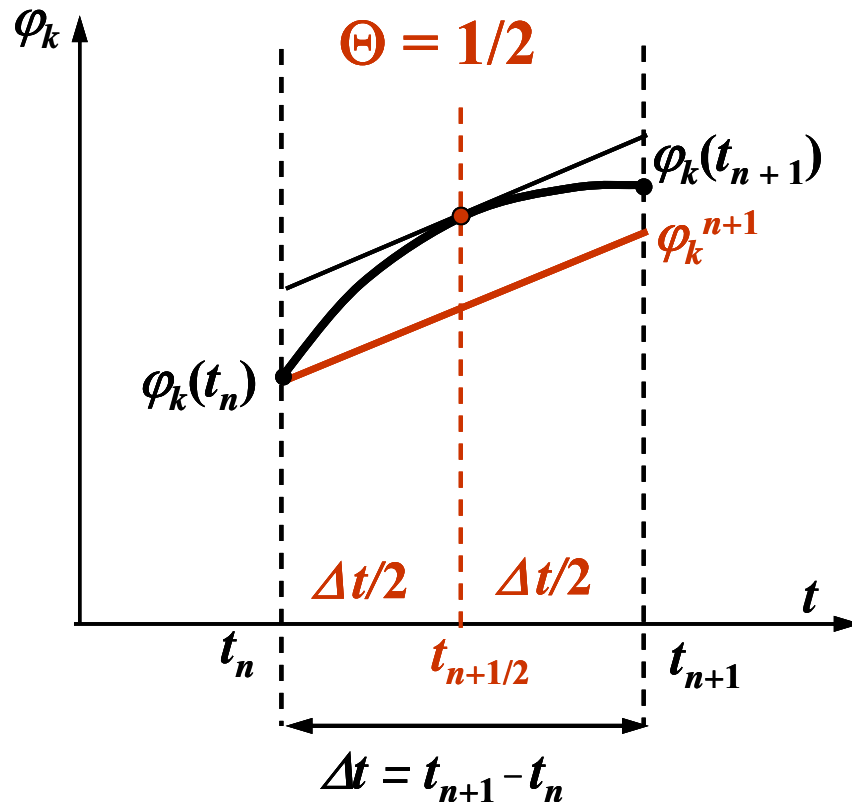
Warunkowo stabilny



Jawny / niejawny jednokrokowy schemat kroczenia w czasie



Schemat Cranka-Nicolsona (centralny)



$$\left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+\Theta} = \left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+1/2} = \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

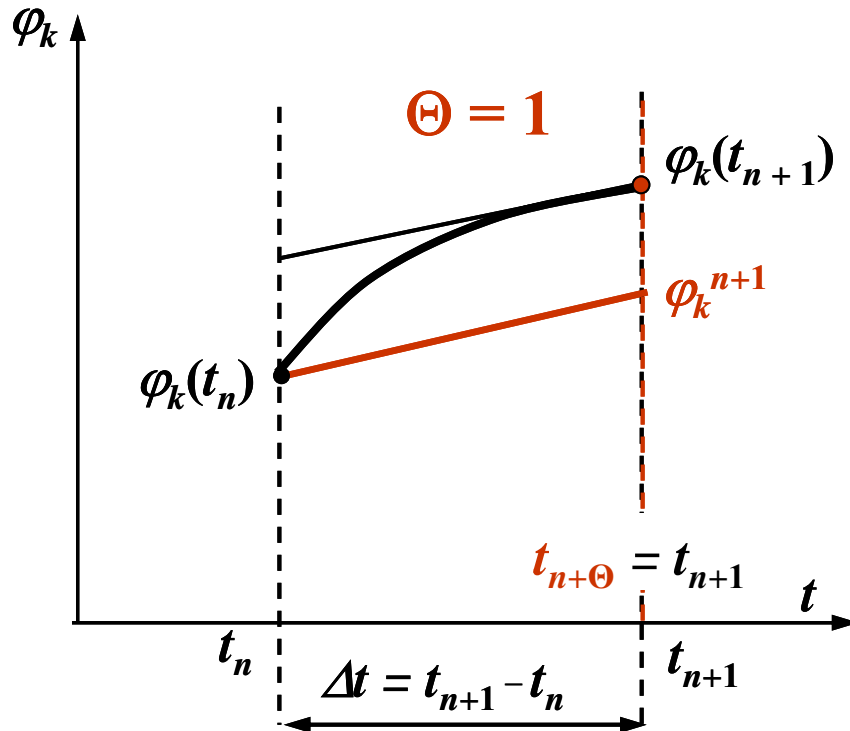
Dokładność drugiego rzędu
Bezwarunkowo stabilny



Jawny / niejawny jednokrokowy schemat kroczenia w czasie



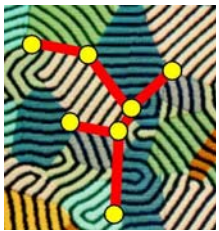
Niejawny (wsteczny) Schemat Eulera



$$\left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+\Theta} = \left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+1} = \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + 0(\Delta t)$$

Dokładność pierwszego rzędu

Bezwarunkowo stabilny



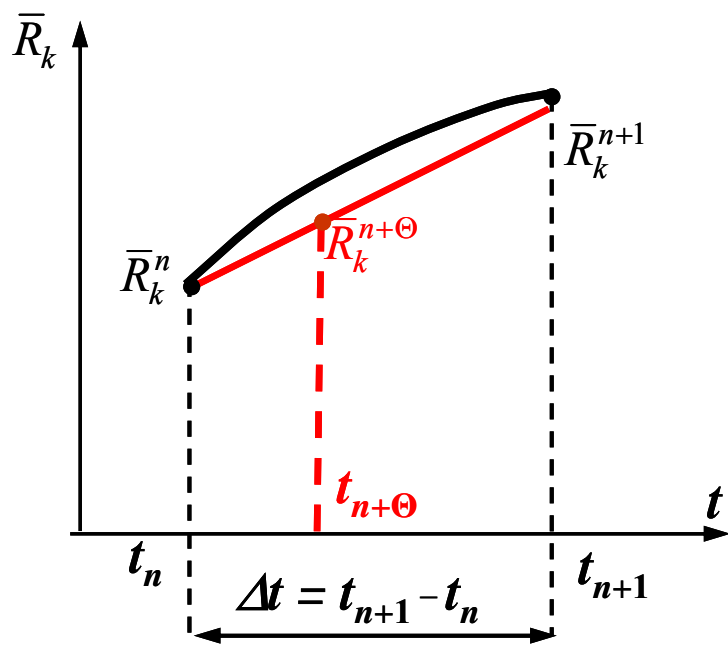
Dyskretne modele MBE i G-MES dla dyfuzji



Równanie dla węzła k
w czasie $t_{n+\Theta}$

$$C_{kk} \frac{d\varphi_k^{n+\Theta}}{dt} = \bar{R}_k^{n+\Theta}$$

gdzie: $\bar{R}_k^{n+\Theta} = R_k - K_{kj} \varphi_j^{n+\Theta}$



Założenia:

$$\left. \begin{aligned} \bar{R}_k^{n+\Theta} &= (1-\Theta) \bar{R}_k^n + \Theta \bar{R}_k^{n+1} \\ \left(\frac{d\varphi_k}{dt} \right)^{n+\Theta} &= \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} \end{aligned} \right\}$$





Dyskretne modele MBE i G-MES dla dyfuzji



$$C_{kk} \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} = (1 - \Theta) \bar{R}_k^n + \Theta \bar{R}_k^{n+1}$$

LUB

$$\left(C_{kk} + \Theta \Delta t K_{kj} \right) \varphi_j^{n+1} = \left(C_{kk} + (1 - \Theta) \Delta t K_{kj} \right) \varphi_j^n + \\ (1 - \Theta) R_k^n + \Theta R_k^{n+1}$$

Macierzowy zapis równań dyskretnych MBE i G-MES

$$\left([\mathbf{C}] + \Theta \Delta t [\mathbf{K}] \right) \{ \varphi^{n+1} \} = \left([\mathbf{C}] - (1 - \Theta) \Delta t [\mathbf{K}] \right) \{ \varphi^n \} + \\ \Delta t \left((1 - \Theta) \{ \mathbf{R} \}^n + \Theta \{ \mathbf{R} \}^{n+1} \right)$$



Rozwiązanie równań modeli MBE i G-MES



➤ METODY BEZPOŚREDNIE:

Eliminacja Gaussa i Gauss-Jordana

LU dekompozycja

Specjalne algorytmy dla macierzy pasmowych (np. algorytm Thomasa)

➤ METODY ITERACYJNE:

Metody Jacobiego i Gauss-Seidela

Metoda nadrelaksacji (SOR)

Metoda gradientów sprzężonych



Modelowanie krzepnięcia stopów na stałej siatce dyskretyzacji



Założenie:

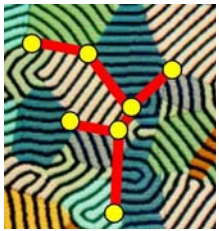
przy braku konwekcji - krzepnięcie stopów metali kontrolowane w skali makroskopowej tylko przez przewodzenie ciepła

Podstawowy problem:

Modelowanie efektu uwalniania ciepła utajonego na stałej siatce dyskretyzacji przestrzennej

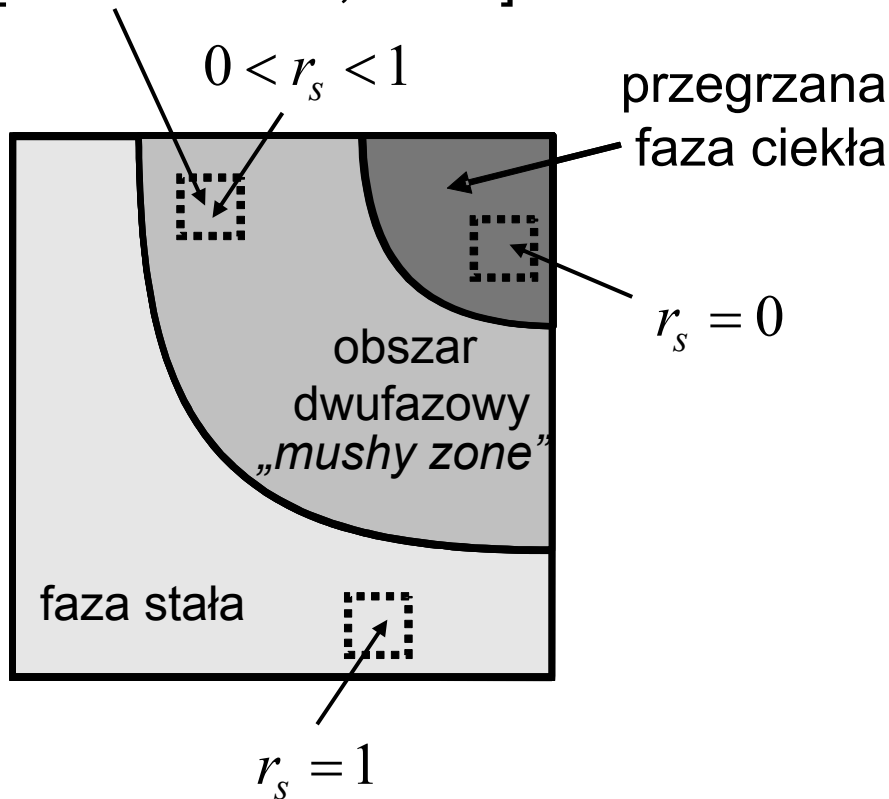
Metody:

- Ogólna metoda entalpowa
- Metoda pozornej pojemności cieplnej
- Sformułowanie oparte na źródle ciepła utajonego



Modele dyfuzyjnego krzepnięcia stopu na stałej siatce

Reprezentacyjna
Elementarna Objętość (**REV**)
[Beckermann, 1987]



Udziały objętościowe
i masowe fazy stałej (s)
i ciekłej (l)

$$r_i = V_i / (V_s + V_l)$$

$$f_i = m_i / (m_s + m_l)$$

gdzie $i=s$ lub $i=l$

warunek saturacji

$$\left. \begin{aligned} r_s + r_l &= 1 \\ f_s + f_l &= 1 \end{aligned} \right\}$$



Jedno-obszarowy model krzepnięcia stopu



$$\frac{\partial(r_s H_s)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(r_s \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + (\text{człon 'interface'}) = 0$$

Przewodzenie
w fazie stałej

$$\frac{\partial(r_l H_l)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(r_l \lambda_l \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - (\text{człon 'interface'}) = 0$$

Przewodzenie
w fazie ciekłej

gdzie:

H_s i H_l - entalpia fazy stałej i ciekłej na jednostkę objętości

λ_s i λ_l - przewodność cieplna fazy stałej i ciekłej

$$\boxed{\frac{\partial(H)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0}$$

Ogólne sformułowanie entalpowe
(General Enthalpy Method)
[Swaminathan & Voller, 1992]



Uśrednione parametry mieszaniny ciało stałe - ciecz



Entalpia mieszaniny na jednostkę objętości

$$H = r_s H_s + r_l H_l$$

Przewodność cieplna mieszaniny

$$\lambda = r_s \lambda_s + r_l \lambda_l$$

Gęstość mieszaniny

$$\rho = r_s \rho_s + r_l \rho_l \quad \text{oraz} \quad \left. \begin{array}{l} \rho f_s = \rho_s r_s \\ \rho f_l = \rho_l r_l \end{array} \right\}$$

Pojemność cieplna mieszaniny

$$\rho c = r_s \rho_s c_s + r_l \rho_l c_l = \rho (f_s c_s + f_l c_l)$$



Entalpie fazowe i entalpia mieszaniny ciało stałe - ciecz



Założenia: stałe entalpie fazowe, stałe ciepło utajone, L , ciepła właściwe są tylko funkcją temperatury

$$H = \rho h = r_s \rho_s h_s + r_l \rho_l h_l = \rho (f_s h_s + f_l h_l)$$

$$h_s = h_{s,ref.} + \int_{T_{ref.}}^T c_s(T) dT$$

gdzie

$$h_l = h_{l,ref.} + \int_{T_{ref.}}^T c_l(T) dT + L$$

Dla: $c_s = \text{const.}$; $c_l = \text{const.}$; $h_{s,ref.} = c_s T_{ref.}$; $h_{l,ref.} = c_l T_{ref.}$.

$$H = r_s \rho_s c_s T + r_l \rho_l (c_l T + L) = \rho (f_s c_s + f_l c_l) T + \rho f_l L$$



Metoda pozornej pojemności cieplnej



$$c_{app.}(T) = \frac{dH}{dT} = \rho(f_s c_s + f_l c_l) + \rho((c_l - c_s)T + L) \frac{df_l}{dT}$$

lub

$$c_{app.}(T) = \frac{dH}{dT} = (\rho_s r_s c_s + \rho_l r_l c_l) + ((\rho_l c_l - \rho_s c_s)T + \rho_l L) \frac{dr_l}{dT}$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{dH}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} = c_{app.}(T) \frac{\partial T}{\partial t}$$

(np. Voller et al., 1990)

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0$$



$$c_{app.} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0$$



Metoda źródła ciepła utajonego

$$c_{app.}(T) = \rho c + \Delta h_{sl} \frac{dr_l}{dT}$$

gdzie

$$\rho c = \rho_s r_s c_s + \rho_l r_l c_l$$

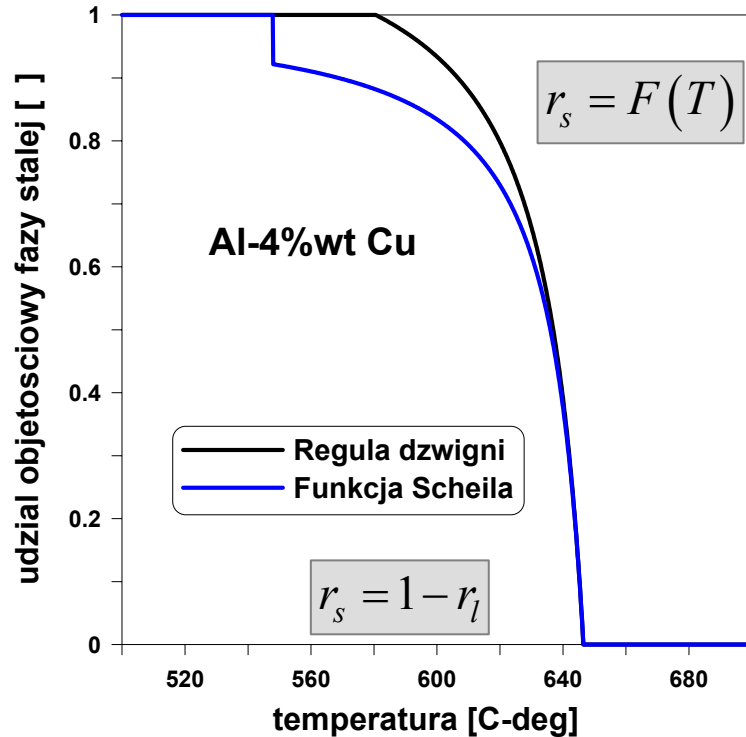
$$\Delta h_{sl} = (\rho_l c_l - \rho_s c_s) T + \rho_l L$$

$$\left(\rho c + \Delta h_{sl} \frac{dr_l}{dT} \right) \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 0$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = -\Delta h_{sl} \frac{\partial r_l}{\partial t}$$



Zależność udziału fazy stałej od temperatury



Przykład związku między udziałem fazy stałej i temperaturą

- Dwie niewiadome: T oraz r_s ;
zależność $r_s = F(T)$ – kluczowa w modelach makroskopowych
- Powszechne założenie w makroskopowym modelowaniu dyfuzyjnego krzepnięcia stopu:
 r_s zależy tylko od T
- Powszechnie stosowane związki – oparte na mikroskopowych modelach pełnego wymieszania substancji rozpuszczonej w fazie ciekłej



MBE i G-MES dla dyfuzyjnego krzepnięcia stopu binarnego



Wszystkie formy równania energii w jedno-obszarowym modelu krzepnięcia stopu binarnego można zapisać ogólnym równaniem dyfuzyjnego transportu skalaru φ :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) = Q_v$$

gdzie:

$\varphi \equiv h_{sens.} = \rho c T$ entalpia na jednostkę objętości

$\chi \equiv \lambda / (\rho c)$ dyfuzyjność cieplna

$Q_v \equiv S_h$ człon źródła ciepła utajonego



MBE i G-MES dla dyfuzyjnego krzepnięcia stopu binarnego



Człon źródła ciepła utajonego:

$S_h = 0$ dla metody pozornej pojemności cieplnej

$S_h = -\Delta h_{sl} \frac{\partial r_l}{\partial t} = \Delta h_{sl} \frac{\partial r_s}{\partial t}$ dla metody źródła ciepła utajonego

WNIOSEK:

Postępuj zgodnie z omówionymi kolejnymi krokami dyskretyzacji przestrzennej i czasowej by otrzymać końcowy układ równań algebraicznych metod MBE lub G-MES



MBE i G-MES dla dyfuzyjnego krzepnięcia stopu binarnego



Macierzowy zapis równań MBE i G-MES

$$\left([\mathbf{C}(T)] + \Theta \Delta t [\mathbf{K}(T)] \right) \{T^{n+1}\} = \left([\mathbf{C}(T)] - (1 - \Theta) \Delta t [\mathbf{K}(T)] \right) \{T^n\} + \Delta t \left((1 - \Theta) \{R(T)\}^n + \Theta \{R(T)\}^{n+1} \right)$$

Równanie dla węzła siatki podziału

$$\left(C_{kj}(T) + \Theta \Delta t K_{kj}(T) \right) T_j^{n+1} = \left(C_{kj}(T) + (1 - \Theta) \Delta t K_{kj}(T) \right) T_j^n + (1 - \Theta) R_k^n(T) + \Theta R_k^{n+1}(T)$$

Nieliniowość jako efekt sprzężenia udziału fazy stałej lub entalpii z temperaturą – konieczność zastosowania procedury iteracyjnej



Równania węzłowe modeli MBE i G-MES



Niejawny schemat Eulera i model LMM macierzy pojemności

$$\theta = 1, C_{kj} = 0 \text{ for } j \neq k$$

➤ Metoda źródła ciepła utajonego – równanie energii
przy $T_j \equiv T_j^{n+1}$, $(r_l)_k \equiv (r_l)_k^{n+1}$ oraz znanym $r_l = F(T)$

$$C_{kk}(T)(T_k - T_k^n) + \Delta t K_{kj}(T)T_j = S_k \Delta h_{sl}(T) \left((r_l)_k^n - (r_l)_k \right)$$

gdzie $S_k = \Omega_k$ dla MBE

$$S_k = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} d\Omega \quad \text{dla G-MES}$$



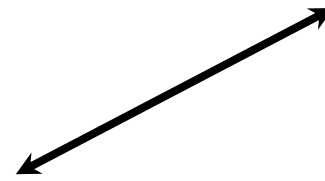
Równania węzłowe modeli MBE i G-MES



- Ogólna metoda entalpowa - równanie energii

przy $T_j \equiv T_j^{n+1}$, $H_k \equiv H_k^{n+1}$, oraz znanym $H = G(T)$

$$\Delta t K_{kj}(T) T_j = S_k (H_k^n - H_k)$$



gdzie

$$S_k = \Omega_k \quad \text{dla MBE}$$
$$S_k = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} M_k^{(e)} d\Omega \quad \text{dla G-MES}$$



Iteracyjne dopasowanie udziału fazy stałej / entalpii i temperatury



Metoda źródła ciepła utajonego (SBM)

Rozwinięcie r_l w szereg Taylora [Voller & Swaminathan, 1991]:

$$\begin{aligned} (r_l)_k^{(m+1)} &= (r_l)_k^{(m)} + \frac{dF}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - T_k^{(m)} \right) = \\ & (r_l)_k^{(m)} + \frac{dF}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - F^{-1} \left((r_l)_k^{(m)} \right) \right) \end{aligned}$$

gdzie:

$$r_l = F(T) \quad - \text{znana funkcja}$$

$$T = F^{-1}(r_l) \quad - \text{odwrotność tej funkcji}$$



Iteracyjne dopasowanie udziału fazy stałej / entalpii i temperatury



Ogólna metoda entalpowa (GEM)

Rozwinięcie H w szereg Taylora [Swaminathan & Voller, 1992]:

$$H_k^{(m+1)} = H_k^{(m)} + \frac{dG}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - T_k^{(m)} \right) =$$
$$H_k^{(m)} + \frac{dG}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - G^{-1} \left(H_k^{(m)} \right) \right)$$

gdzie:

$$H = G(T) \quad - \text{znana funkcja}$$

$$T = G^{-1}(H) \quad - \text{odwrotność tej funkcji}$$



Iteracyjne dopasowanie udziału fazy stałej / entalpii i temperatury



Algorytm kolejnych przybliżeń [Voller & Swaminathan, 1991, 1992]:

1. Dla kolejnego $(n+1)$ kroku czasowego Δt przyjmij

$$\text{dla } m = 0: T_k^{(m)} = T_k^n \text{ oraz } (r_l)_k^{(m)} = (r_l)_k^n \text{ w SBM}$$

$$\text{lub } H_k^{(m)} = H_k^n \text{ w GEM}$$

2. Dla znanej m – tej iteracji $T^{(m)}$, $(r_l)^{(m)}$ lub $H^{(m)}$ oblicz

$$K_{ij}(T^{(m)}); C_{kk}(T^{(m)}); \frac{dF}{dT}(T^{(m)}) \text{ oraz } F^{-1}\left((r_l)^{(m)}\right) \text{ w SBM}$$

$$\text{lub } K_{ij}(T^{(m)}); \frac{dG}{dT}(T^{(m)}) \text{ oraz } G^{-1}\left(H^{(m)}\right) \text{ w GEM}$$



Iteracyjne dopasowanie udziału fazy stałej / entalpii i temperatury



3. Rozwiąż zlinearyzowane równanie energii by uzyskać nowe przybliżenie węzłowych wartości temperatury $T_k^{(m+1)}$
4. Oblicz nowe węzłowe wartości r_l lub H na podstawie ich odpowiednich rozwinięć w szereg Taylora

$$(r_l)_k^{(m+1)} = (r_l)_k^{(m)} + \frac{dF}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - F^{-1} \left((r_l)_k^{(m)} \right) \right) \quad \text{w SBM}$$

lub

$$H_k^{(m+1)} = H_k^{(m)} + \frac{dG}{dT} \left(T_k^{(m+1)} - G^{-1} \left(H_k^{(m)} \right) \right) \quad \text{w GEM}$$



Iteracyjne dopasowanie udziału fazy stałej / entalpii i temperatury



5. Sprawdź zbieżność przez porównanie dwóch kolejnych iteracji H

JEŚLI:
$$\max_k \left| \frac{H_k^{(m+1)} - H_k^{(m)}}{H_k^{(m)}} \right| < \text{zadana tolerancja}$$

idź do następnego kroku czasowego

W PRZECIWNYM PRZYPADKU:

$$T_k^{(m)} = T_k^{(m+1)}; (r_l)_k^{(m)} = (r_l)_k^{(m+1)} \text{ lub } H_k^{(m)} = H_k^{(m+1)}$$

kontynuuj procedurę od kroku 2 do kroku 5 aż do uzyskania zbieżności



Przykłady obliczeniowe



- **PRZYKŁAD 1:**
Symulacja G-MES krystalizacji stopu Al-2%wt.Cu
w kwadratowej formie odlewniczej

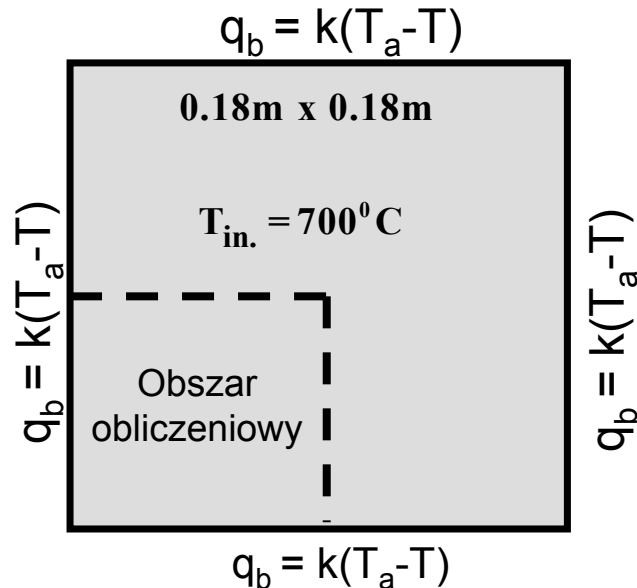
- **PRZYKŁAD 2:**
Obliczenia krystalizacji kierunkowej
w podłużnej próbce Al-7%wt.Si metodą MBE



PRZYKŁAD 1: specyfikacja problemu



Geometria obszaru i warunki brzegowe



$$T_a = 400^\circ\text{C}, k = 500\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$$

Własności fizyczne

Al-2%wt.Cu

$$T_S = 610^\circ\text{C}, T_L = 655^\circ\text{C}$$

$$\lambda_s = 150\text{W}/(\text{mK}), \lambda_l = 75\text{W}/(\text{mK})$$

$$c_s = c_l = 1360\text{J}/(\text{kg K}), L = 408\text{kJ}/\text{kg}$$

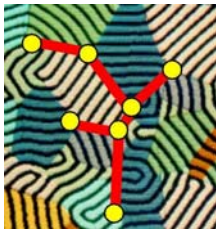
model dyfuzji Scheila

Model numeryczny

G-MES oraz Ogólna Metoda Entalpowa (GEM)

50*50 dwuliniowych elementów

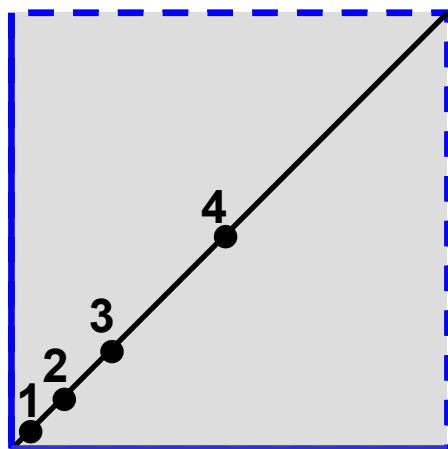
Niejawny schemat Eulera, $\Delta t = 0.5\text{s}$



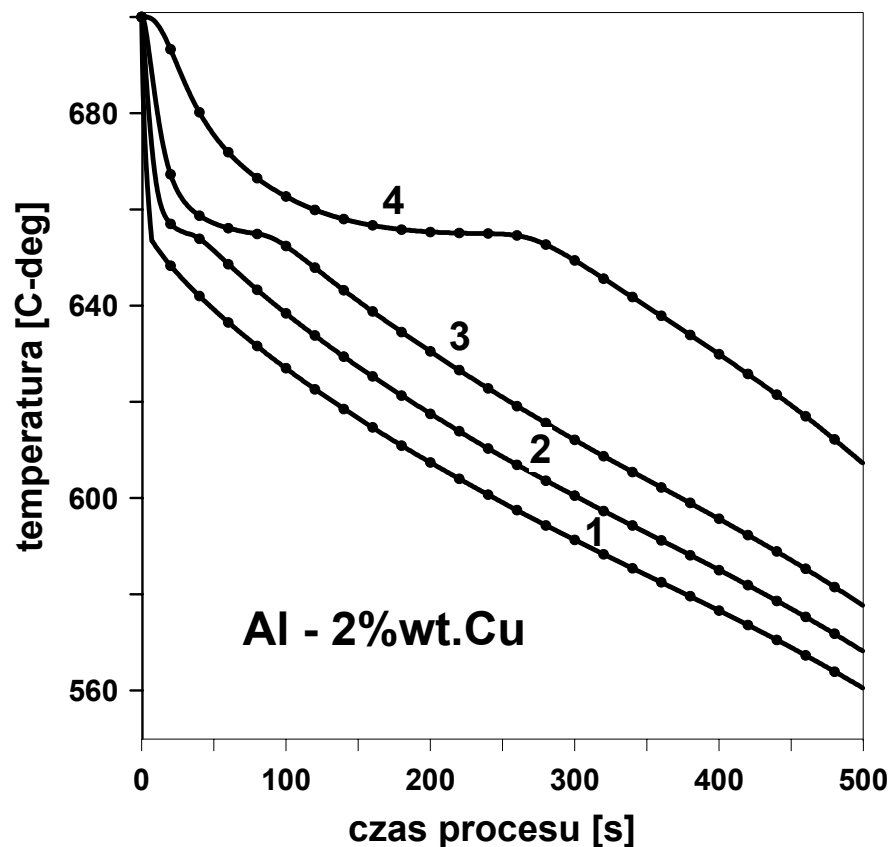
PRZYKŁAD 1: Wyniki

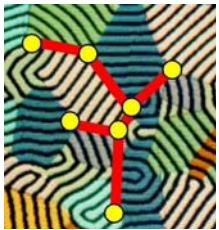


Krzywe chłodzenia w wybranych punktach na przekątnej odlewu



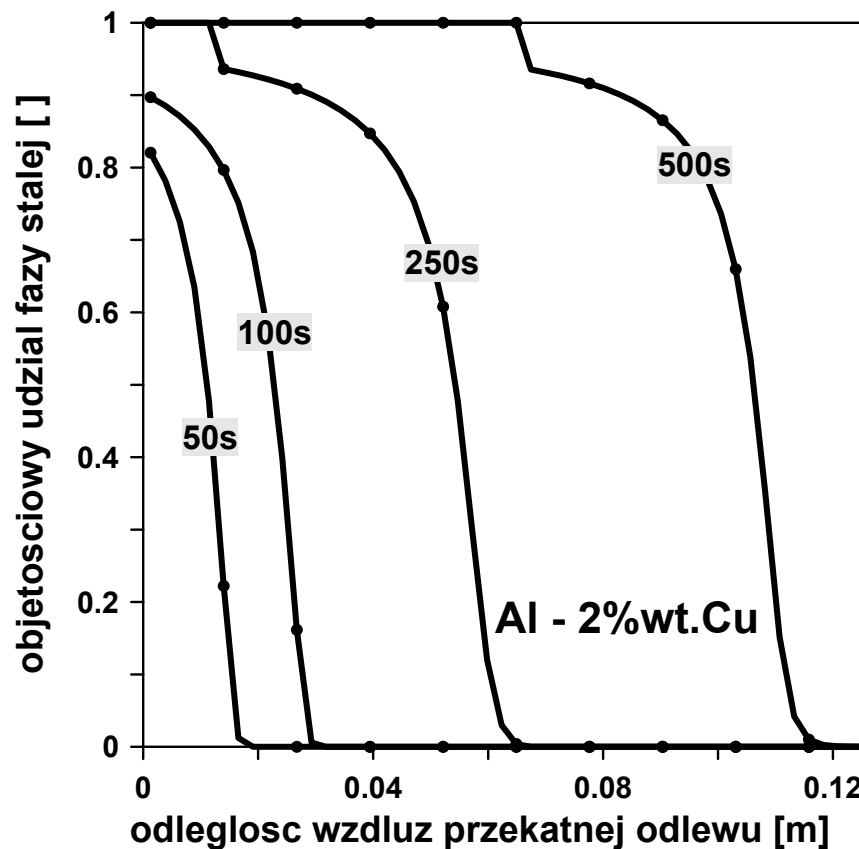
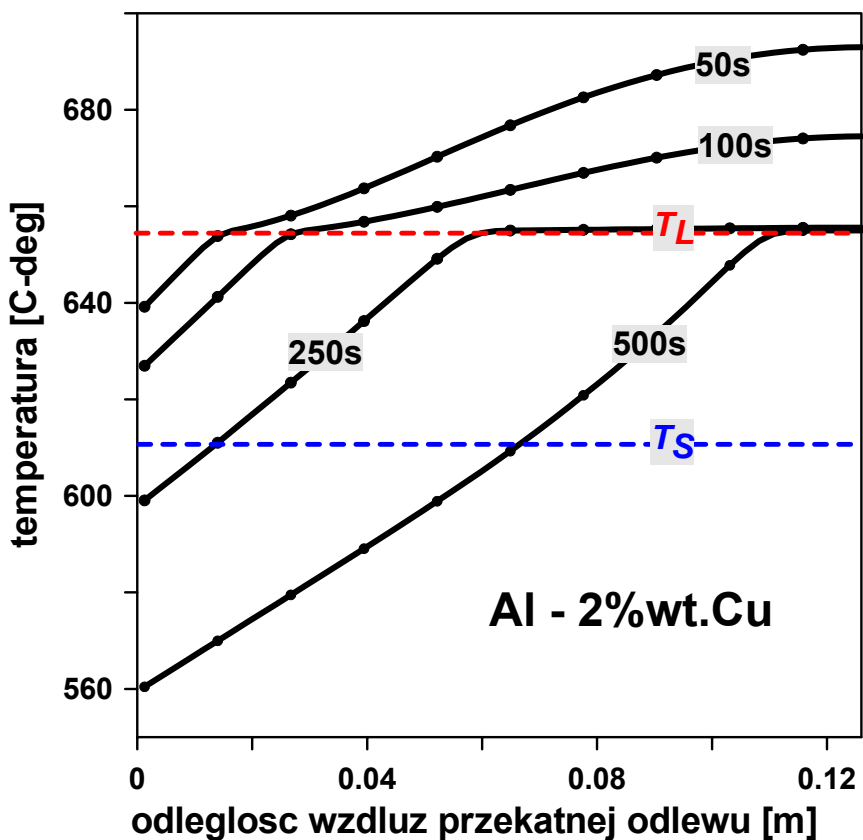
Obszar obliczeniowy i wybrane punkty na diagonalu odlewu

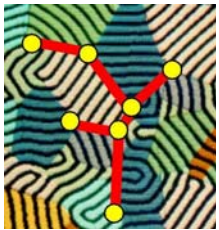




PRZYKŁAD 1: Wyniki

Temperatura i udział fazy stałej wzdłuż diagonali odlewu dla różnych czasów krzepnięcia





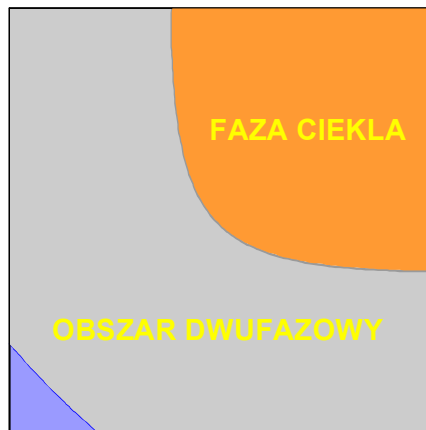
PRZYKŁAD 1: Wyniki



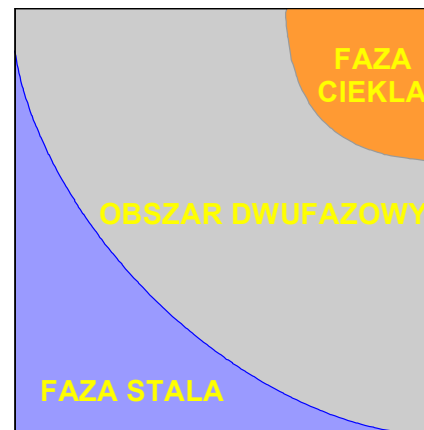
Ewolucja obszarów: fazy stałej, dwufazowego i przegrzanej fazy ciekłej



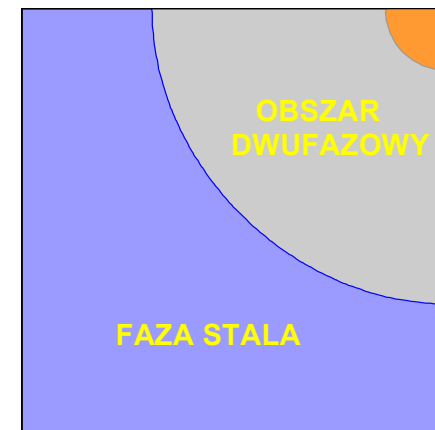
czas = 100s



czas = 250s



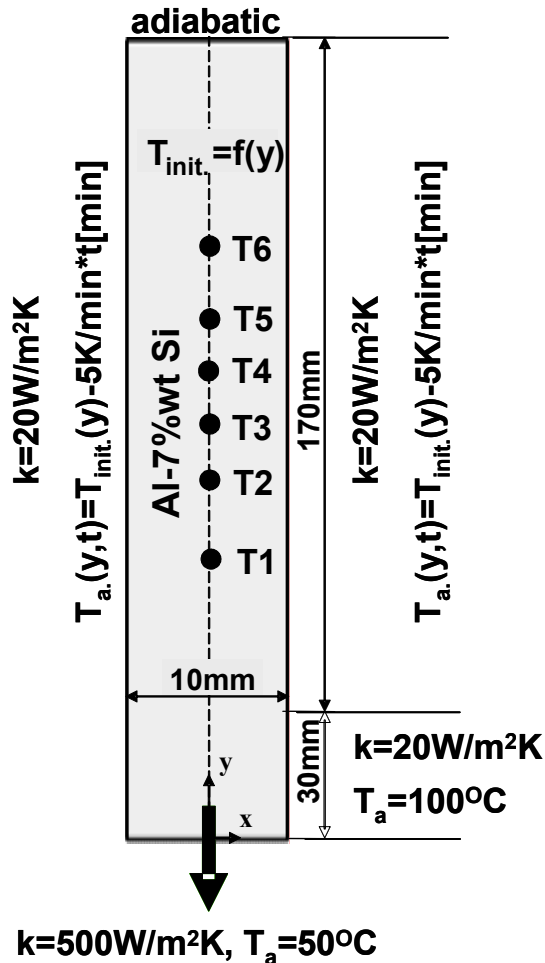
czas = 400s



czas = 500s



PRZYKŁAD 2: specyfikacja problemu



Własności fizyczne

Al-7%wt.Si

$$T_E = 577^\circ C, T_L = 614^\circ C$$

$$\lambda_s = 170 W/(mK), \lambda_l = 70 W/(mK)$$

$$c_s = 920 J/(kg K), c_l = 1140 J/(kg K),$$

$$\rho = 2530 kg/m^3, L = 397 kJ/kg$$

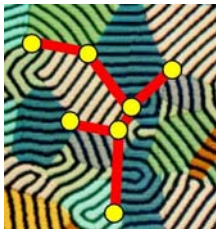
model dyfuzji Scheila

Model numeryczny

MBE oraz Metoda Źródła Ciepła Utajonego (SBM)

Regularna siatka 11*220 obj. kontr.

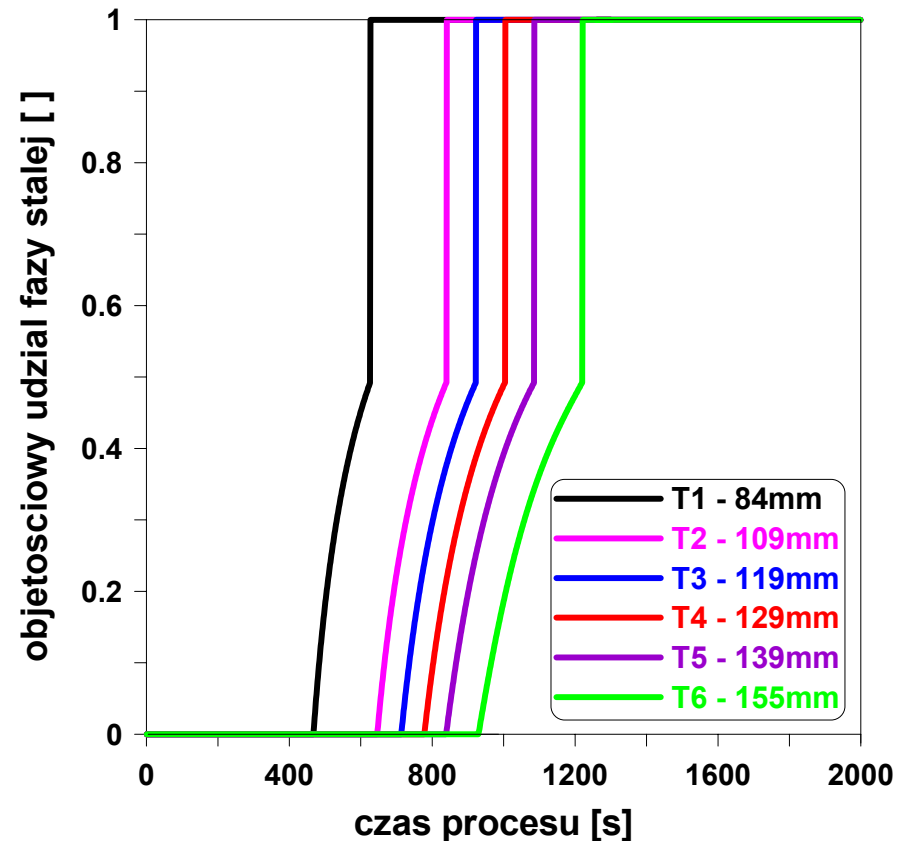
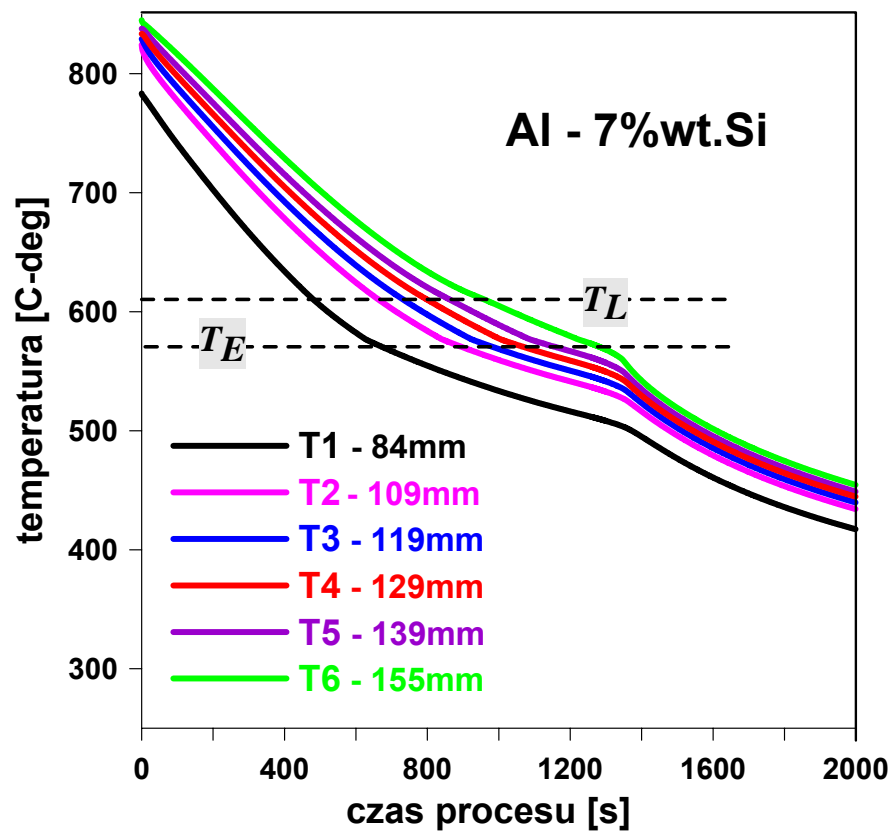
Niejawny schemat Eulera, $\Delta t = 1s$

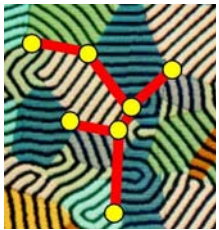


PRZYKŁAD 2: Wyniki



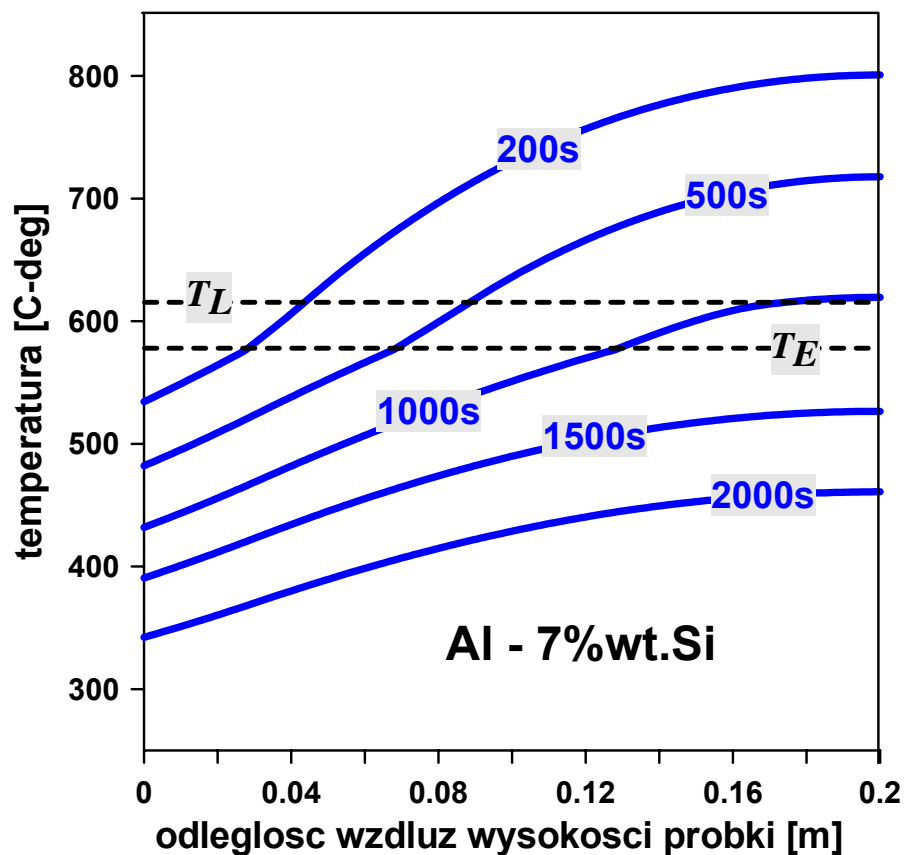
Krzywe chłodzenia i zmiany udziału fazy stałej w czasie w wybranych punktach próbki





PRZYKŁAD 2: Wyniki

Temperatura wzdłuż wysokości próbki





Uwagi końcowe, dyskusja



- Efektywne własności makroskopowe zależą od mikroskopowych procesów transportu i rozwijającej się mikrostruktury
- Sprzężenie między zjawiskami w skalach mikro i makro jest możliwe poprzez precyzyjną analizę zmian udziału fazy stałej w obszarze dwufazowym
- W obliczeniach makroskopowych powszechnie stosowane są modele „całkowitego wymieszania” (*reguła dźwigni, model Scheila*)



Uwagi końcowe, dyskusja



Makroskopowe obliczenia, uwzględniające dyfuzję substancji rozpuszczonej i składnikowe przewodzenie, możliwe poprzez:

- zaawansowane modele udziału fazy stałej (patrz przegląd: M.Rappaz, *Int. Mat. Rev.*, vol.34, 1989)
- jednoczesne rozwiązanie makroskopowego równania energii i mikroskopowych równań dyfuzji składnika (C.Y. Wang & C.Beckermann, *Metall. Mater. Trans.* 25A, 1994)
- nową technikę śledzenia frontu fazowego na stałej siatce opartą na założonej kinetyce końców dendrytów (D.J.Browne & J.D.Hunt, *Num.Heat Transfer, Part B*, 45, 2004)