

Progress in modelling and simulation of the machining process – part I: Multiscale modelling

Postęp w modelowaniu i symulacji procesu skrawania – część I: Modelowanie wieloskalowe

WIT GRZESIK*

DOI: <https://doi.org/10.17814/mechanik.2024.3.4>

In this paper some rules of a multiscale modelling and numerical simulations of fundamental physical phenomena associated with the machining process, including mechanisms of plastic deformation, chip formation and interfacial friction are overviewed. Some representative examples of the modelling application to multiphase and composite materials, determination of constants in the material constitutive equations and simulation of nano- and micromachining processes using MD-FEM and SPH-FEM hybrid methods are given.

KEYWORDS: multiscale modelling, numerical simulations, machining process, plastic deformation, chip formation, interfacial friction, MD-FEM, SPH-FEM

W artykule omówiono zasady wieloskalowego modelowania i symulacji numerycznej podstawowych zjawisk fizycznych towarzyszących procesowi skrawania, w tym mechanizmów odkształcania materiału, tworzenia wióra i tarcia. Podano przykłady zastosowania modelowania materiałów wielofazowych i kompozytowych, wyznaczania stałych materiałowych w równaniu konstytutywnym oraz symulacji mikro- i nanoobróbki z użyciem hybrydowej metody MD-FEM i SPH-FEM.

SŁOWA KLUCZOWE: modelowanie wieloskalowe, symulacja numeryczna, proces skrawania, odkształcanie materiału, tworzenie wióra, tarcie, MD-FEM, SPH-FEM

Wprowadzenie

Techniki wieloskalowego modelowania są efektywnymi narzędziami umożliwiającymi łączenie wielu skal przedstawionych na rys. 1, pozwalającymi na powiązanie makroskopowego zachowania się materiału z mikroskalowymi cechami i mechanizmami. Dzięki temu mogą być wykorzystane do licznych zastosowań w modelowaniu i symulacji w mechanice ciała stałego.

Zastosowania modelowania wieloskalowego obejmują nie tylko projektowanie materiałów o optymalnej strukturze i właściwościach, w tym materiałów kompozytowych wzmacnianych nanocząstkami (FRP), ale także projektowanie procesów wytwórczych, m.in. kształtowania addytywnego metodą SLM oraz obróbki plastycznej i ubytkowej, nawet w skali mikro i nano [1–4]. Z kolei symulacja numeryczna z zastosowaniem metod hybrydowych, takich jak metody oparte na łączeniu dynamiki molekularnej (*molecular dynamics* – MD) z metodą elementów skończonych (*finite element method* – FEM) w mo-

delu dwuskalowym (MD-FEM), pozwala rozwiązać ważny problem czasochłonności obliczeń. Występuje on nągninnie w przypadku stosowania jednorodnej siatki elementów skończonych o bardzo małym wymiarze elementu siatki [1, 4, 5].

Na rys. 1 przedstawiono przegląd metod modelowania i symulacji w układzie czas–długość skali, począwszy od skali atomowej (stałej atomowej), poprzez nanoskalę i mezoskalę, aż do makroskali ($>10^{-3}$ m). Są to kolejno:

- AIMD – *ab initio (from first principles) molecular dynamics*,
- DFT (*density functional theory*),
- ReaxFF MD (*reactive force-field MD*),
- klasyczna (deterministyczna) metoda MD,
- klasyczna (stochastyczna) metoda Monte Carlo (MC),
- metoda obszaru faz (*phase field method*),
- FEM.

Metodę DFT/MD (*ab initio molecular dynamics*) stosuje się do obliczeń sił między atomami w każdym kroku czasowym. Metody MD i MC są natomiast stosowane w komputerowej symulacji systemów wielocząsteczkowych. W obydwóch przypadkach są to problemy z zakresu chemii kwantowej i molekularnej. Należy zauważyć, że modelowanie można prowadzić w dwojaki sposób, a mianowicie w dół skali (*top-down*) i w górę skali (*bottom-up*).

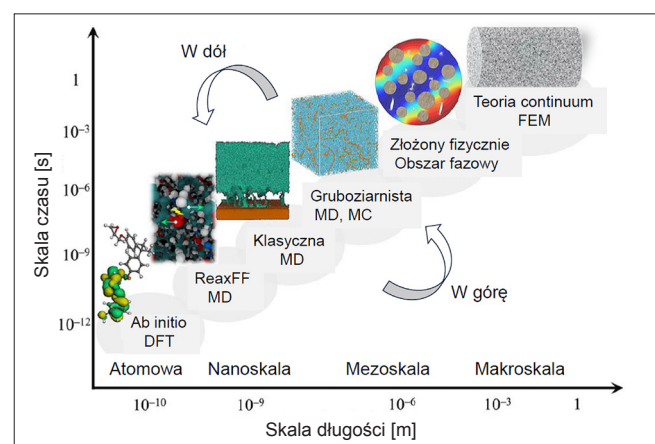


Fig. 1. Diagram showing applications of different modelling methods in the continuum solid mechanics in the time–length coordinate system [1]

Rys. 1. Wykres przedstawiający zastosowania różnych metod modelowania w mechanice ciała stałego w układzie współrzędnych czas–długość [1]

* Prof. dr hab. inż. Wit Grzesik – wit.grzesik@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3898-5119> – Opole, Polska

Modelowanie i symulacja zachowania się materiału obrabianego i narzędzia

Modelowanie mikrostruktury może obejmować zarówno materiał obrabiany, jak i narzędzia do ustalenia jego zachowania się pod wpływem obciążeń mechanicznych i cieplnych. Stanowi istotny krok do zwiększenia dokładności symulacji numerycznej procesu i operacji skrawania, a zwłaszcza materiałów wielofazowych. Wynika to z faktu, że właściwości takich materiałów, np. węglików spiekanych typu WC-Co, są silnie zależne od wewnętrznych cech ich mikrostruktury, takich jak wymiar ziarna, kształt i rozkład faz konstytuujących, oraz cech międzyfazowych. Na rys. 2 przedstawiono kolejne etapy w wieloskalowej analizie mikrostruktury materiału – od nanometrycznej siatki atomowej do milimetrowej skali makroskopowej materiału.

Przykłady modeli mikrostruktury materiałów wyznaczonych na drodze modelowania numerycznego zaprezentowano na rys. 3. W przypadku modelowania materiałów o strukturze polikrystalicznej (wielofazowej) można zastosować zmodyfikowaną metodę dla materiałów jednorodnych RVE (*representative volume element*), w której dokonuje się replikacji rzeczywistej mikrostruktury odwzorowanej za pomocą mikroskopii skaningowej (SEM) lub odwrotnej dyfrakcji elektronowej (EBSD – *electron backscattering diffraction*). Inne podejście polega na zastosowaniu różnych metod statystycznych i numerycznych, np. DREAM.3D (*Voronoi tessellations, a synthetic grain structure builder*), Monte Carlo (MC) i CCBUILDER [2]. W ten sposób z obrazu 2D rzeczywistej mikrostruktury generuje się strukturę syntetyczną, jak na rys. 3a. W przypadku mikrostruktury węglika WC-Co (10% wt), przed-

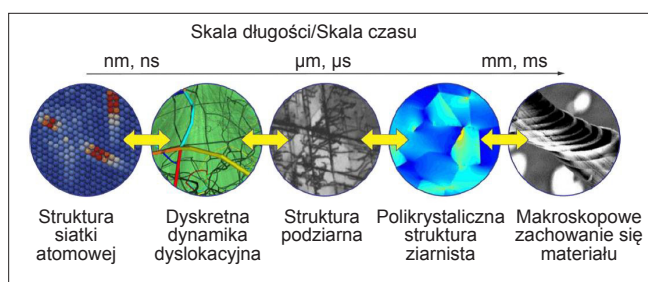


Fig. 2. Comparison of material structure length/time scales [16]
Rys. 2. Porównanie skal długości/czasu w strukturze materiałowej materiałów [16]

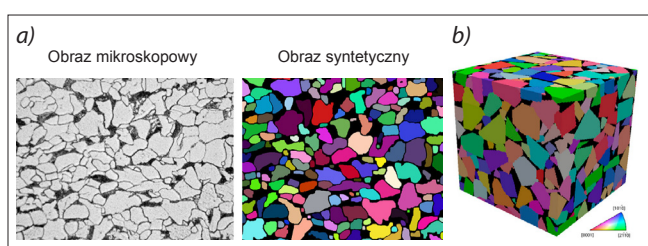


Fig. 3. Examples of the DMR obtained based on the optical microscopy image of a two-phase steel (a) and synthetic microstructures generated for WC-Co (10% wt) (b) [2, 6]
Rys. 3. Przykłady wygenerowanej syntetycznej mikrostruktury (DMR) stali dwufazowej opartej na mikroskopowym obrazie optycznym (a) i węglika spiekanego WC-Co (10% wt) (b) [2, 6]

stawionej na rys. 3b, do analizy i segmentacji obrazów odwzorowanych z rzeczywistej mikrostruktury zastosowano metodę automatycznej rekonstrukcji (*automated reconstruction*) MIPAR™ [2] i dodatkowo specjalne algorytmy uczące (*pulse-coupled neural networks* – PCNN) w celu segmentacji mikrostruktury umożliwiającej wygenerowanie siatki FEM (MES).

Obróbce skrawaniem poddaje się najczęściej materiały metalowe o strukturze polikrystalicznej (zbudowane z monokryształów) (patrz rys. 2), a ich odkształcenie plastyczne może się dokonywać przez poślizg i bliźniakowanie [5]. Należy przypomnieć, że poślizg rozwija się stopniowo i rozpoczyna się kolejno w płaszczyznach i kierunkach, w których naprężenie styczne najwcześniej osiągnie wartość krytyczną, ale z uwagi na jego anizotropowość może zachodzić przy mniejszych wartościach naprężeń stycznych, w tzw. systemach łatwego poślizgu. Efekty odkształcenia plastycznego w skali mikrostruktury widoczne są w postaci pasm poślizgu składających się z wielu linii poślizgu, jak na rys. 4.

Ze względu na występowanie w sieci krystalicznej defektów liniowych zwanych „dyslokacjami” poślizg zachodzi, gdy granica plastyczności przy ścinaniu jest o kilka rzędów wielkości mniejsza. Przykładowo: dla czystego żelaza odpowiednie wartości naprężeń stycznych wynoszą 11 000,0 MPa i 29,0 MPa [5]. Wyróżnia się: dyslokacje krawędziowe, śrubowe i mieszane, ale w rzeczywistym kryształe występują rozmaite typy dyslokacji mieszanych o zmieniającym się udziale charakteru śrubowego i krawędziowego. Przejścia dyslokacji przez kryształ są podstawowym mechanizmem powodującym powstanie trwałych odkształceń. Z tego względu modelowanie mikrostruktury powinno uwzględniać ruch dyslokacji jak na rys. 2.

Z modelu płytkowego (pasm) poślizgu przedstawionego na rys. 4 wyznacza się bezwymiarową miarę stopnia odkształcenia plastycznego, która wynosi $\gamma = \Delta s/d$.

Mechanizm poślizgu w mikro- i nanoskali jest wyjaśniany w oparciu o metodę symulacji molekularnej

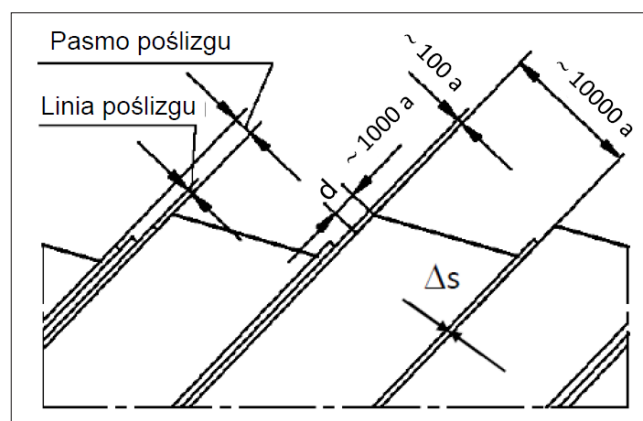


Fig. 4. Scheme of the shear phenomenon and the effect of shear band displacement at the outer chip surface; symbols: a – atomic lattice constant, d – displacement of the shear band, Δs – width of the shear band [5]

Rys. 4. Schemat poślizgu oraz efekt przemieszczenia pasm poślizgu na powierzchni zewnętrznej; symbole: a – parametr sieci krystalicznej, d – przemieszczenie pasma poślizgu, Δs – szerokość pasma poślizgu [5]

(MD) lub zastosowanie modelu dwuskalowego (MD-FEM), które uwzględniają efekt wpływu dyslokacji [4, 7, 8]. W przypadku metali o dużej plastyczności, np. czystej miedzi i aluminium, usuwany jest ciągły i stabilny wiór o grubości kilku nanometrów, analogicznie jak w skrawaniu konwencjonalnym, ale składowe siły skrawania, temperatura skrawania, drgania i zużycie ostrza diamentowego są od trzech do czterech rzędów wielkości mniejsze [4].

Na rys. 5 przedstawiono rozkład dyslokacji w strefie atomowej materiału poddanej ścisnaniu (rys. 5a) i po relaksacji (rys. 5b) w dwóch odstępach czasu po próbie zarysowania (*scratch test*). Numerami 1–5 zaznaczono widoczne linie poślizgu związane z drogą przemieszczania się dyslokacji w strefie atomowej. Głębokość zarysowania była równa 2,0 nm, a przemieszczenie rysika 100 nm/s. Widać wyraźnie penetrację co najmniej pięciu dyslokacji w głąb materiału oraz wnikanie dyslokacji o numerach 1–3 do ciągłego obszaru o charakterze *continuum*.

Z kolei na rys. 5b można dostrzec, że wraz z postępem ruchu ostrza co najmniej cztery z pięciu zaznaczonych dyslokacji doznają poślizgu wstecznego i znikają na powierzchni swobodnej. Z przytoczonych obserwacji wynika, że wewnętrzny obszar materiału przyległy do płaszczyzny poślizgu nie wykazuje charakterystycznej koncentracji naprężeń poślizgu, ale jest poddany działaniu prawie stałych i dużych naprężeń ściskających. Potwierdza to rolę dużych naprężeń hydrostatycznych w ułatwianiu poślizgu, co obserwuje się w procesie skrawania [5].

Na rys. 5c przedstawiono rozkład siły normalnej i stycznej w funkcji prędkości narzędzia (rysika) uzyskanych z danych zebranych podczas bruzdowania z głębokością 2,0 nm na długości 100 nm. Z rys. 5c jasno wynika, że poza zakresem propagacji fali płynięcia plastycznego wartości sił gwałtownie maleją (orientacyjnie powyżej 300 m/s), co dobrze koresponduje z obszarem przejścia od dyslokacyjnie wymuszonego płynięcia plastycznego materiału do amorficznego stanu kryształu (patrz rys. 11b1 i b2).

Symulacja metodą elementów skończonych i hybrydową FEM-SPH/FEM-DM

W modelowaniu procesu skrawania najczęściej stosuje się takie metody FEM jak Lagrangiana, Eulera czy ALE (*arbitrary Lagrange–Eulerian*) [4, 5] i wiele komercyjnych pakietów oprogramowania, np. DEFORM, ABAQUS, ANSYS, Advant Edge. W celu uzyskania wiarygodnych wyników symulacji należy wprowadzić odpowiednie dane wejściowe, w tym równanie konstytutywne, i dopasować siatkę elementów skończonych do konkretnego obiektu badań. Na rys. 6 przedstawiono schemat symulacji procesu skrawania kombinowaną metodą FEM, w którym model narzędzia jest przedstawiony w domenie Lagrange'a, a usuwana warstwa materiału – w domenie Eulera [9].

Taka kombinowana konfiguracja modelu MES umożliwia dyskretyzację narzędzia z oczkiem siatki $0,005 \pm 0,1$ mm i mniejszym wymiarem oczka siatki $0,005 \pm 0,05$ mm w obszarze materiału przekształcanego w wiór. Symulację przeprowadzono w postaci 3D, z zastosowaniem pakietu oprogramowania ABAQUS/Explicit. Przykład oryginalnego zastosowania metody FEM ALE do wyznaczenia rozkładu temperatury (mapy termicznej) w strefie skrawania w toczeniu stali AISI 4340 ostrzem z węgla spiekane go bez powłoki zaprezentowano na rys. 6b.

W praktyce, ale na mniejszą skalę, stosowana jest symulacja MES z zastosowaniem dużych elementów przestrzennych, tzw. *voxeli* (zamiast klasycznej siatki elementów skończonych), co pozwala wyznaczyć odkształcenia całego przedmiotu w czasie obróbki. Rozwijane jest modelowanie bez zdefiniowanej siatki (bezsiatkowe) typu SPH (*smooth particle hydrodynamics*) i hybrydowe typu MES (FEM)-SPH [4, 8–10].

Przykład hybrydowego modelu 2D skrawania ortogonalnego złożonego z siatki cząstek SPH (górna część) i siatki MES (dolna część), który uwzględnia warunki zbieżności tych dwóch elementów, przedstawiono na rys. 7a. Zadano płaski model odkształcenia opisany równaniem konstytutywnym typu Johnsona–

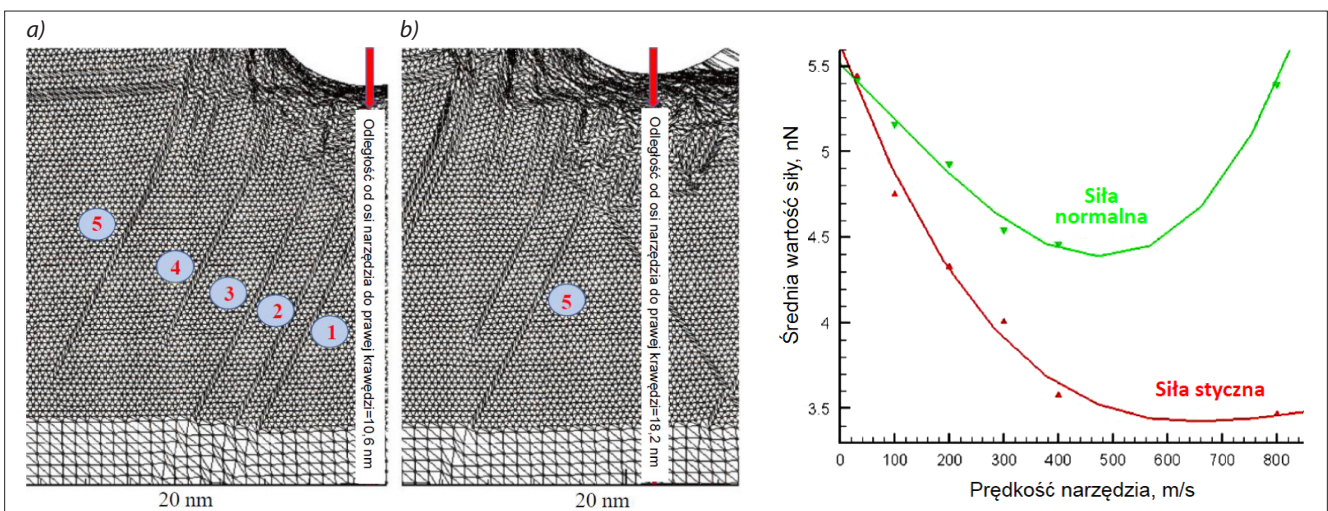


Fig. 5. Distribution of dislocations in the material under compression (a) and after relaxation (b) determined using multiscale modelling of MD + FEM type and force distribution in the scratch test vs. tool speed [4, 7]

Rys. 5. Rozkład dyslokacji w materiale poddanym ścisnaniu (a) i po relaksacji (b) uzyskany z modelowania wieloskalowego typu MD + FEM oraz rozkład sił w teście zarysowania vs. prędkość narzędzia (c) [4, 7]

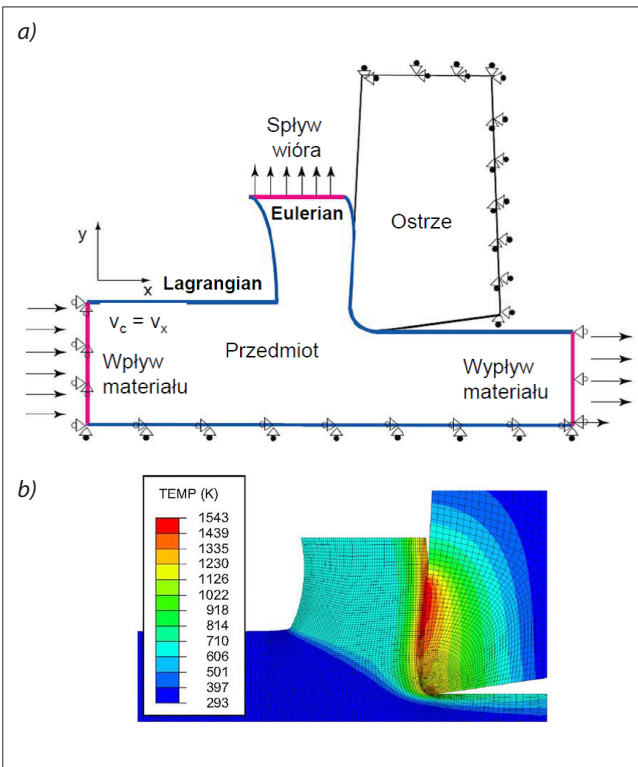


Fig. 6. Scheme of the coupled FEM Eulerian-Lagrange (ALE) model for orthogonal cutting (a) and generated thermal map in the cutting zone (b) [9]

Rys. 6. Schemat połączonego modelu FEM Eulerian-Lagrange (ALE) skrawania ortogonalnego (a) i uzyskany rozkład temperatury w strefie skrawania (b) [9]

-Cooka (J-C) ze skumulowanym modelem uszkodzenia (dekohezji) materiału typu D [5], co oznacza, że ruch cząstek SPH i elementów siatki MES jest całkowicie ograniczony w kierunku osi Z.

Na rys. 7b przedstawiono wyniki symulacji 2D modelu tworzenia wióra segmentowego w skrawaniu ortogonalnym stopu aluminium A2024-351 z obrazowaniem rozkładu stopnia odkształcenia (*effective plastic strain*) i zmiennej uszkodzenia (*damage variable*). Problemem w modelowaniu 2D metodą (SPH-FEM) jest stosunkowo mała efektywność obliczeń i dokładność prognozy składowych sił skrawania, rzędu 50%. Z tego powodu w modelach 3D, które wymagają bardzo dużej liczby cząstek SPH, stosuje się celowe zawyżenie rzeczywistej prędkości skrawania przez współczynnik 5×, 10× lub 20×, aby ograniczyć czas symulacji [4].

Na rys. 7c przedstawiono koncepcję hybrydowej symulacji procesu skrawania opartą na połączeniu techniki SPH dla przedmiotu i FEM dla narzędzia. W celu wyznaczenia rozkładu temperatury w strefie skrawania stopu Ti6Al4V ostrzem WC-Co opracowano nową metodę transferu ciepła między modelami składowymi. Dzięki dokładnemu zdefiniowaniu kontaktu termicznego na powierzchni styku wiór-ostrze uzyskano dobrą zgodność z wynikami komercyjnej symulacji FEM i wynikami pomiarów. Obliczenia przeprowadzono na jednostce przetwarzania graficznego GPU (*graphics processing unit*) w celu ich przyspieszenia.

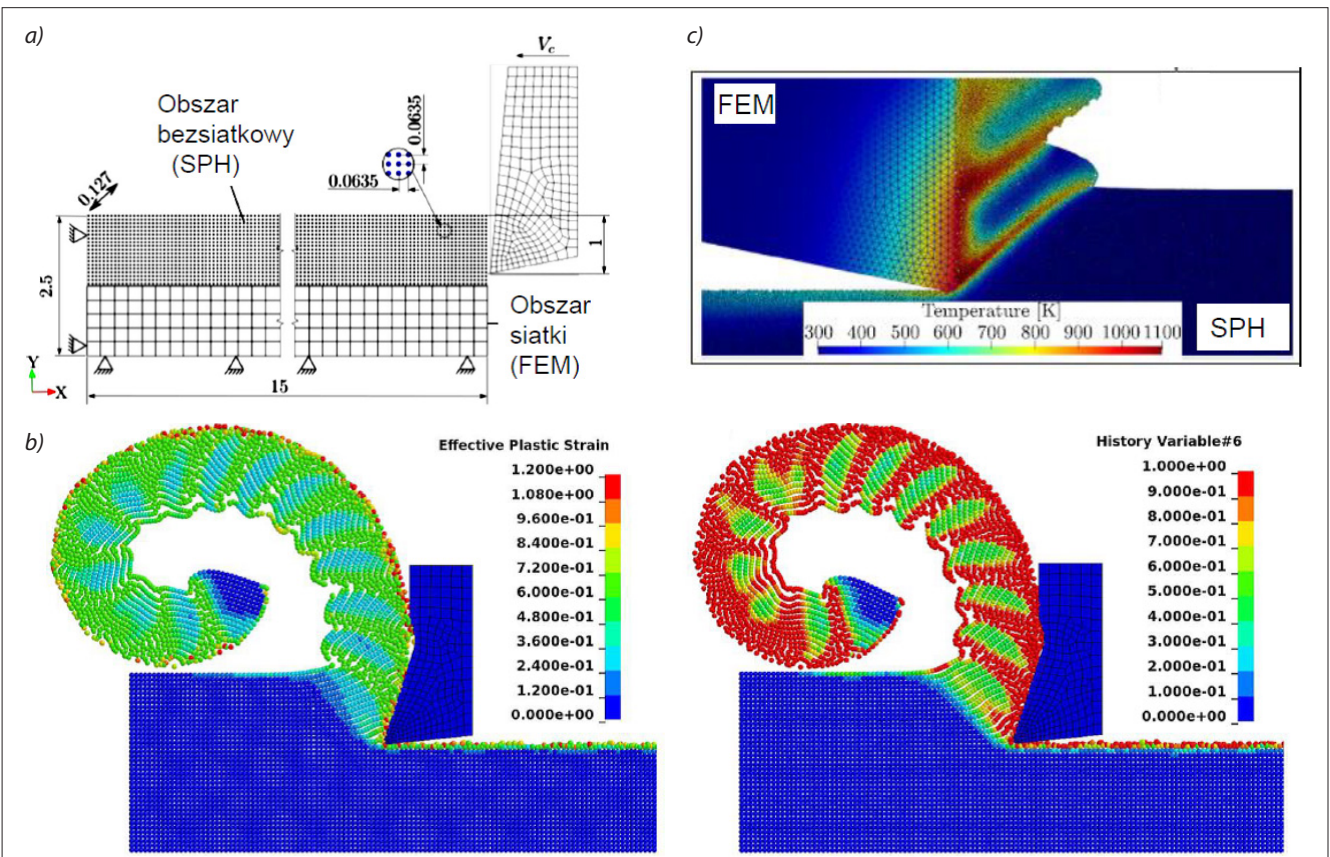


Fig. 7. 2D simulation model of orthogonal cutting using FEM-SPH method showing model geometry and boundary conditions (a) and 2D simulation of segmented chip showing distributions of the effective plastic strain and damage variable (b) [9, 10], and method concept according to [20] (c)

Rys. 7. Model 2D symulacji metodą FEM-SPH skrawania ortogonalnego z wyróżnieniem geometrii i warunków brzegowych (a) i symulacja 2D tworzenia wióra segmentowego z rozkładem stopnia odkształcenia uplastyczniającego i zmiennej uszkodzenia (b) [9,10] oraz koncepcja metody według [20] (c)

Metoda skończonego zbioru punktów (FPM – *finite pointset method*) ma pewne podobieństwa do poprzednio omówionej metody SPH. W przedstawionym na rys. 8a modelu 2D FPM widać wyraźnie swobodne cząstki zamiast typowej siatki MES. Na uwagę zasługuje sztywny (utwierdzony) model narzędzia i brak warunków wymiany ciepła z otoczeniem typowy dla klasycznej metody FEM (rys. 6a). Wynik symulacji zobrazowano na rys. 8b dla skrawania nadstopu Inconel 718, porównując geometrię strefy tworzenia wióra z rzeczywistym wiórem uzyskanym z urządzenia do szybkiego zatrzymania procesu (*quick-stop device*).

Modelowanie procesu mikro- i nanoobróbki

Badania procesu obróbki ultraprecyzyjnej należą do dynamicznie rozwijającego się, w dużej mierze nowego działu obróbki skrawaniem zwanego „mikro-/nanoskrawaniem” [1, 5, 6]. W nanoskrawaniu typowe wartości grubości warstwy skrawanej są mniejsze od 1 μm , a niekiedy nawet od 1 nm, natomiast promień zaokrąglenia krawędzi ostrza z monokryształu diamentu znajduje się w zakresie 1,5÷4,5 nm.

W mikro-/nanoskrawaniu możliwość usuwania nadmiaru wynika z efektu skali, który może być interpretowany w trojaki sposób, tj. jako efekt skali promienia zaokrąglenia krawędzi skrawającej, skali mikrostruktury materiału i właściwości materiału [4, 8].

Pierwszy przypadek dotyczy bardzo małej wartości stosunku h/r_n , drugi – gdy wymiar ziarna jest porównywalny z promieniem zaokrąglenia krawędzi skrawającej/grubością warstwy skrawanej, a trzeci – jeśli stosunek wymiaru obrabianego fragmentu części do wymiaru ziarna jest bliski 1 lub wzrasta stosunek jego pola powierzchni do objętości. Efektem tych ograniczeń jest wtedy silna zależność odkształceń plastycznych od ruchliwości dyslokacji i pojawia się konieczność uwzględnienia w mechanizmie odkształcenia dyslokacji, jak na rys. 4 [4–6].

Modelowanie i symulacja procesu mikro-/nanoskrawania odbywają się metodą elementów skończonych (FEM/MES), przede wszystkim metodą ALE (*arbitrary Lagrange–Euler*), dynamiki molekularnej (MD) i symulacji wieloskalowej (*multiscale simulation* – MS) [4, 9]. Symulacja metodą MES, np. procesu mikrofrezowania, odbywa się analogicznie jak dla procesu tradycyjnego, z tym że dużą uwagę zwraca się na powstawanie mikrozadziórów, siły składowe i generowanie ciepła.

W badaniach procesu mikro-/nanoskrawania istotny jest wpływ zaokrąglenia (ostrości) krawędzi skrawającej na tworzenie wióra i kształtowanie chropowatości powierzchni. Realizowane są badania eksperymentalne i symulacja komputerowa metodą MD z użyciem graficznego programu do wizualizacji 3D (*visual molecular dynamics*, VMD) [4, 9]. Metoda MD jest w zasadzie ograniczona do struktur złożonych z kilku milionów

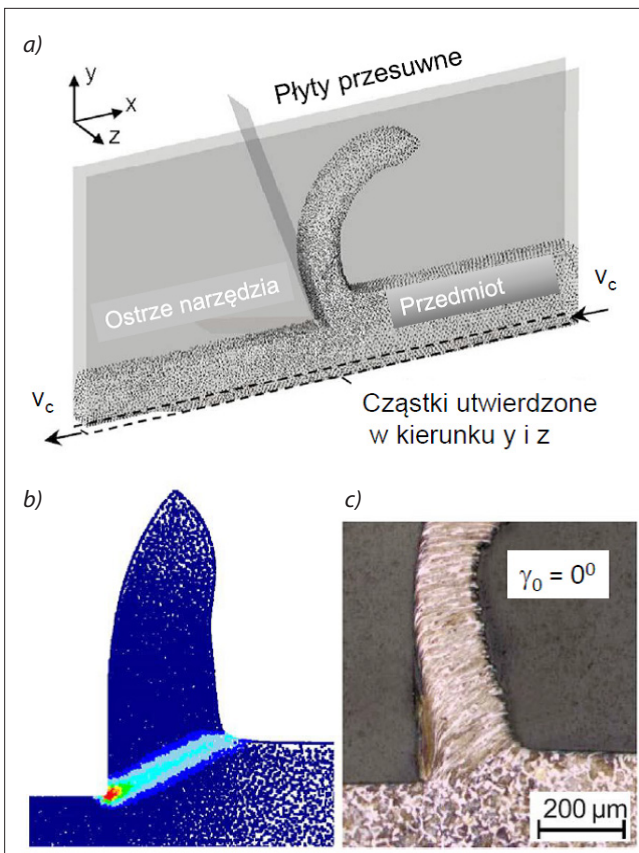


Fig. 8. An FPM model for orthogonal machining of Inconel 718 (a), FPM simulation (b) and experimental result of chip formation (metallographic image of the chip root) (c) [9]

Rys. 8. FPM model ortogonalnego skrawania stopu Inconel 718 (a) oraz wynik symulacji metodą FPM (b) i obraz metalograficzny nasady wióra (c) [9]

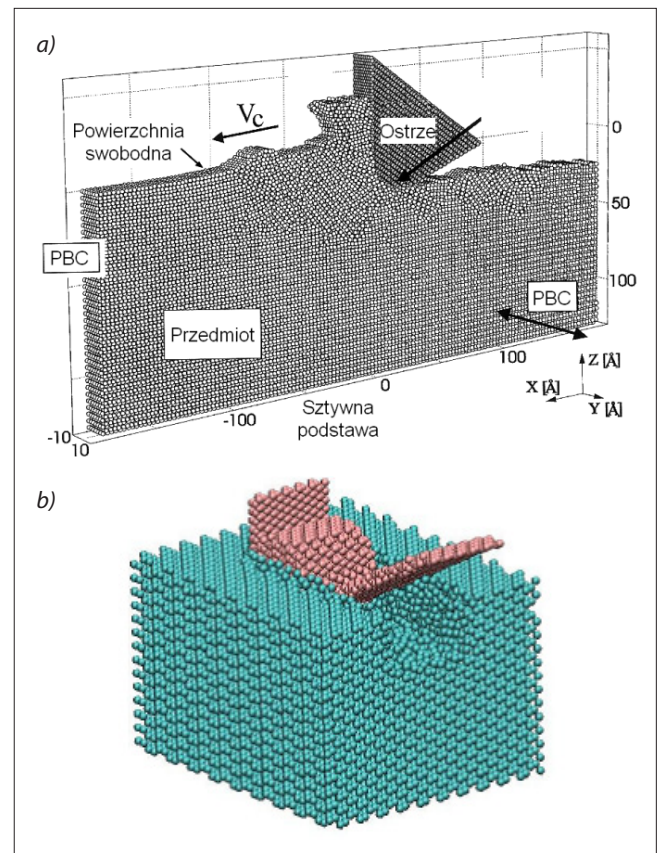


Fig. 9. Simulation MD of machining performance of single copper crystal (a) and atomic scale cutting model of pure copper/aluminium and monocrystal SiC using diamond monocrystal tool (b) [4, 5, 12]

Rys. 9. Symulacja MD przebiegu skrawania kryształu miedzi (a) oraz atomowy model skrawania czystej miedzi/aluminium i monokryształicznego SiC ostrzem z monokryształu diamentu (b) [4, 5, 12]

atomów i skali czasu do pikosekund i z tego powodu jest dominującym narzędziem w symulacji w skali nano [5, 8, 12]. W fazie eksperymentalnej obserwuje się przebieg odkształceń plastycznych na mikroskopie skaningowym, który montuje się na ultraprecyzyjnej, miniaturowej tokarce z *in situ* pomiarem ustawienia narzędzia. Symulacja komputerowa obejmuje analizę naprężeń, odkształceń, płynięcia materiału i generowania ciepła.

Na rys. 9a przedstawiono model skrawania monokryształu miedzi ostrzem z monokryształu diamentu dla wymiarów przedmiotu o krotności stałej sieci atomowej (a), który jest zbudowany z atomów brzegowych, termostatycznych i newtonowskich. Atomy termostatyczne przewodzą i odprowadzają generowane ciepło. Cały model przedmiotu na rys. 9a zawiera 43 240 atomów miedzi o sieci krystalicznej *fcc*, a model narzędzia – 10 992 atomy węgla o strukturze diamentu. Z kolei na rys. 9b zaprezentowano analogiczny model zastosowany do nanoskrawania monokrystalicznego SiC. Na podstawie symulacji MD przeprowadzonej dla trzech wartości promienia krawędzi skrawającej (0,5; 1,5 i 5 nm) ustalono, że minimalna grubość warstwy skrawanej zmierzona z osiągalną technicznie dokładnością wynosiła około 1 nm, tj. $1/20 \pm 1/10$ promienia zaokrąglenia krawędzi skrawa-

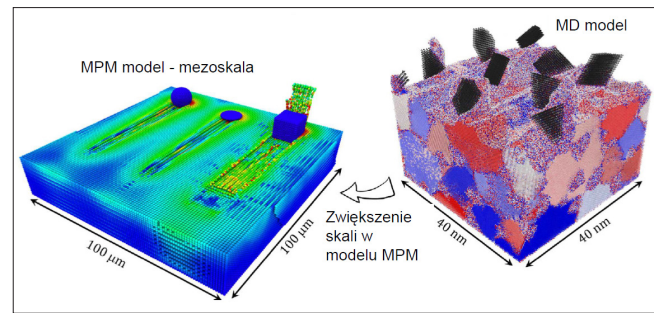


Fig. 10. Grinded workpiece and machined surface generation using MD + MPM multiscale modelling system [16]

Rys. 10. Generowanie mikrostruktury szlifowanego przedmiotu oraz obrabianej powierzchni metodą modelowania wieloskalowego MD + MPM [16]

jącej, natomiast sam proces jest bardziej energochłonny, ponieważ około 50% energii jest zużywane na odkształcanie materiału pod ostrzem, czyli dużo więcej niż w skali makro [4, 5].

Znaczne skrócenie czasu symulacji (nawet trzykrotne) uzyskuje się metodą ARMD (*area-restricted molecular dynamics*) polegającą na ograniczeniu obszaru symulacji dynamiki molekularnej. Symulację oparto na modelu ruchu dyslokacji w strefie poślizgu z założeniem istnienia ruchu dyslokacji typu zig-zag, który polega na ich przechodzeniu z obszaru kontaktu

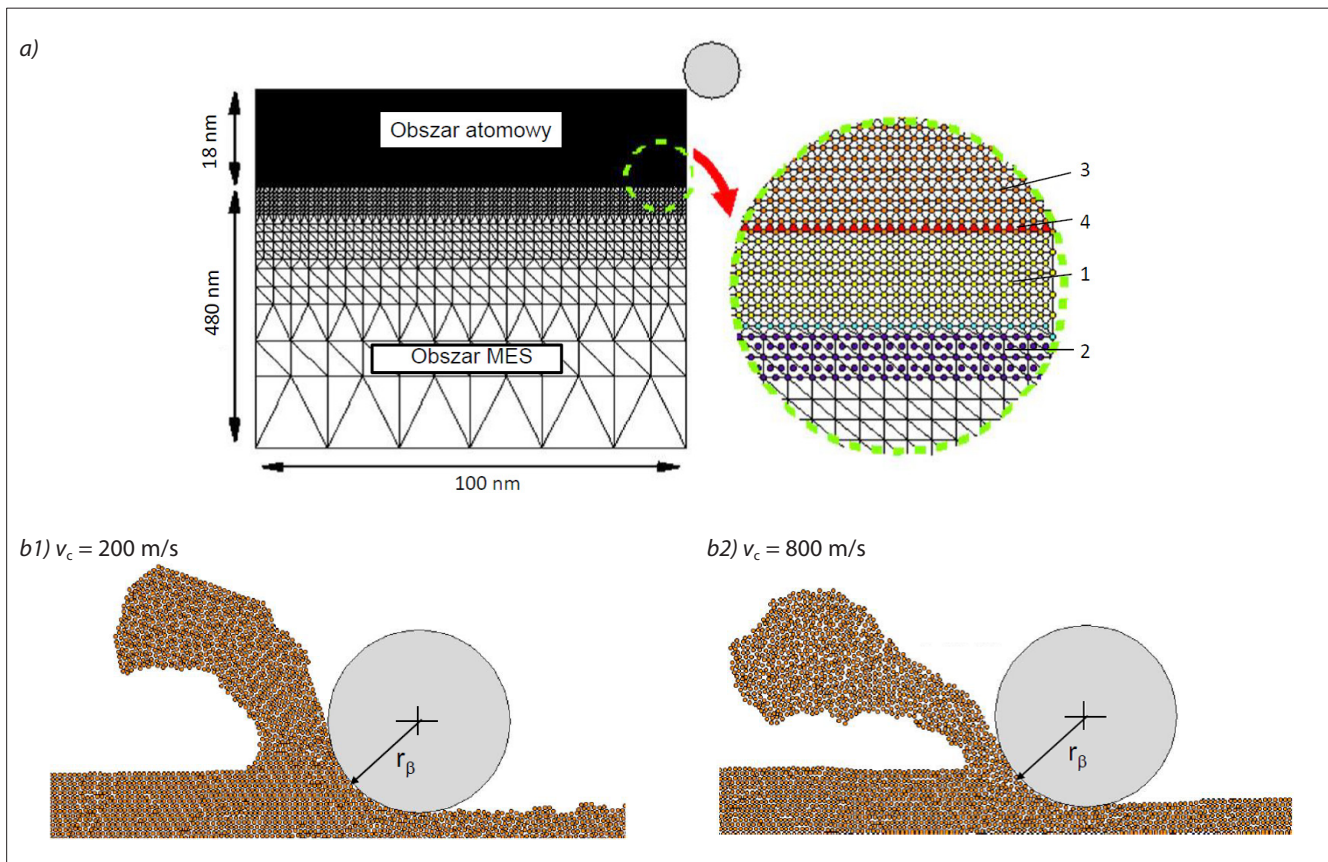


Fig. 11. Multiscale model geometry and a close-up of the atomistic/continuum interface which shows continuum elements, atoms, pad atoms and interface atoms (a) and close-up of chip profile for two different tool speed: $b1$) 200 m/s; $b2$) 800 m/s [7]. Symbols: 1 – the atom/nodes created the actual interface between the two regions, 2 – mesh elements that lie inside the continuum region created a “pad” of atoms to couple the atoms to the continuum region, 3 – detection elements, 4 – atoms located in damping band region. The depth of scratching is equal to 2,0 nm

Rys. 11. Symulacja 2D tworzenia wióra metodą wieloskalową (MD + FEM): a) geometria modelu, b) widok tworzenia wióra dla prędkości: $b1$) 200 m/s i $b2$) 800 m/s [7]. Oznaczenia: 1 – atomy/węzły tworzące granicę między dwoma regionami, 2 – elementy siatki tworzące warstwę nośną (podkładkę) łączącą region atomowy i kontinuum, 3 – wykrywane elementy, 4 – atomy zlokalizowane w warstwie tłumiącej. Głębokość zarysowania wynosi 2,0 nm

materiału z ostrzem, przez strefę poślizgu, do powierzchni swobodnej. Na podstawie przeprowadzonej symulacji trajektorii przemieszczeń atomów roboczych i chwilowych wartości temperatury każdego z atomów w cyklu 60 000 kroków (odpowiadającym przemieszczeniu ostrza o około 12 nm) ustalono, że tworzenie wióra w nanoskali jest podobne do zaobserwowanego podczas mikroskrawania.

W przypadku szlifowania przedmiotu z nanokryształicznej stali węglowej o zawartości 1,7 wt% C w pierwszej fazie za pomocą metody MD uzupełniono model mikrostruktury o początkowej polikryształicznej strukturze ferrytycznej o ziarna cementytu (Fe_3C), jako drugiej fazy, zbliżając się do poziomu makroskopowego, jak na rys. 10b. Wyjściowy 3D-periodyczny system o wymiarach $85 \times 85 \times 85 \text{ nm}^3$, zawierający około 200 losowo zorientowanych ziaren, wygenerowany w programie Dream.3D microstructure, został zaimportowany do pakietu symulacyjnego Matlab. Następnie z zastosowaniem metody MD w większej skali dokonano symulacji procesu szlifowania mikroziarnami z tlenku aluminium $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, które rozmieszczono nad powierzchnią przedmiotu. Wizualizację systemu cząsteczek uzyskano w programie OVITO.

W kolejnym kroku wygenerowano model tworzenia mikrotopografii powierzchni w mezoskali (rys. 9a), stosując bezsiatkową metodę MPM (*material point method*). W tym przypadku zaobserwowano poprawne odtworzenie formowania wióra i wydajności procesu w dużej skali. Takie podejście umożliwia optymalizację procesu z uwzględnieniem kryterium wydajności i jakości powierzchni.

Z kolei modele w skali mikro, a często nawet nano, stosuje się do badania zmian zachodzących w materiale w trakcie procesu, np. w przypadku zmian mikrostruktury, twardości czy ruchu dyslokacji stosuje się tzw. modelowanie wieloskalowe MD-FEM, polegające na połączeniu metody dynamiki molekularnej (MD) z klasyczną metodą elementów skończonych (FEM). Na rys. 11a przedstawiono geometrię hybrydowego modelu wieloskalowego MD-FEM z zaznaczeniem granicy atomistycznej i kontinuum, zawierającej elementy ciągłe siatki MES, atomy, atomy podłoża/podkładki i atomy na powierzchni rozdziału podmodeli. Na rys. 10b pokazano tworzenie wióra z prędkością 200 m/s i 800 m/s i głębokością 2,0 nm. Widoczne są odkształcenia plastyczne wywołane obecnością linii poślizgu. Tworzone wióry mają w zależności od prędkości skrawania budowę polikryształiczną (b1) albo amorficzną (b2).

Na rys. 12 przedstawiono schemat wieloskalowego modelu nanoskrawania próbki z czystej miedzi, który łączy modelowanie MES i MD [4, 7, 13, 14]. Można łatwo zaobserwować, że strefa kontaktu ostrza z próbką jest zamodelowana jako region atomowy (region MD), podczas gdy pozostała strefa jest objęta modelem MES (FEM). W ten sposób wyjściowy model wieloskalowy został zredukowany do obszaru $500 \text{ \AA} \times 500 \text{ \AA} \times 4a$ (a jest stałą sieci atomowej Cu w strukturze *fcc* równą $3,62 \text{ \AA}$) z około 510 atomami zamiast 250 000 atomów w klasycznym modelu MD. Diamentowe ostrze jest

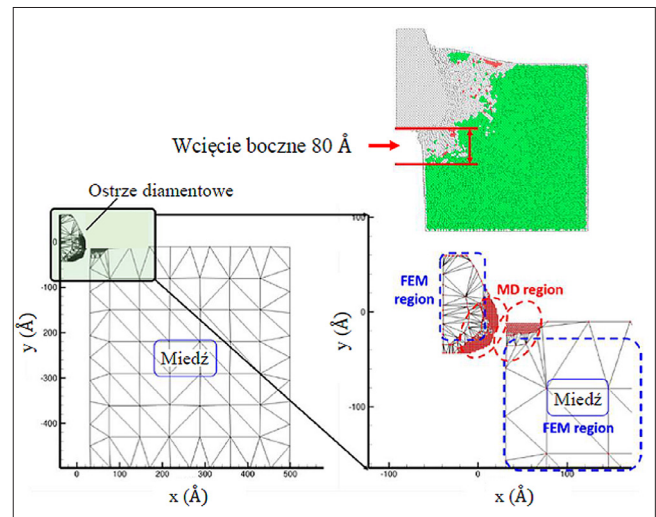


Fig. 12. A scheme of multiscale model of nanomachining of sample made of pure copper [4, 15]

Rys. 12. Schemat wieloskalowego modelu nanoskrawania próbki z czystej miedzi [4, 15]

ciałem sztywnym przemieszczającym się z prędkością 1 \AA/ps [13].

Na rys. 13a pokazano metodykę symulacji termicznej procesu szlifowania płytek ostrzowych z porowatych węglików spiekanych ściernicą z PCD ($v_c = 10 \text{ m/s}$, $v_f = 1486 \text{ mm/min}$) w obecności cieczy chłodzącej-smarującej i wygenerowane mapy termiczne (rys. 13b), gdy do symulacji w skali mikro/mezo

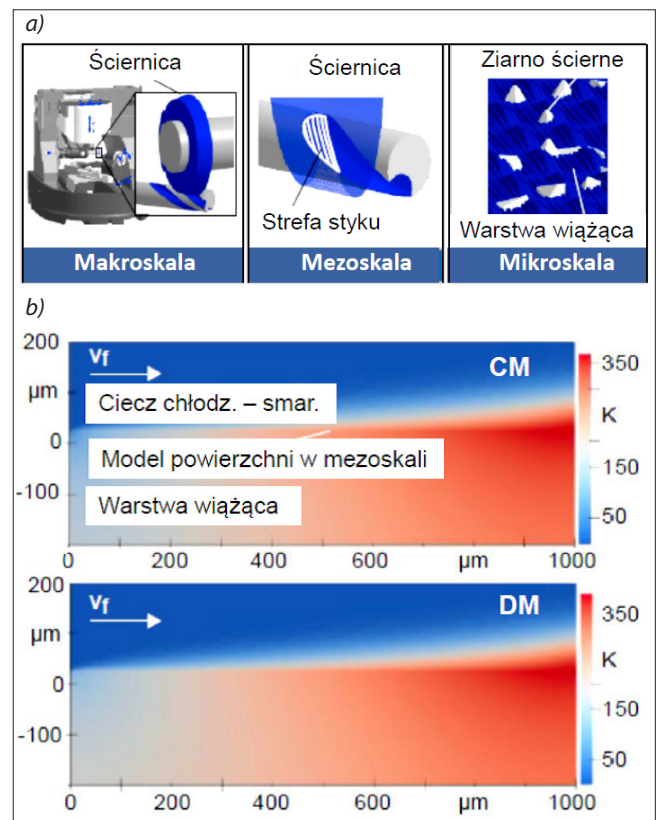


Fig. 13. Methodology of multiscale modelling of tungsten carbide grinding with PCD wheel (a) and temperature distribution in the mesoscale determined by means of CM and DM modelling techniques [19]

Rys. 13. Metodyka modelowania wieloskalowego w szlifowaniu węglików spiekanych ściernicą z CBN (a) i rozkład temperatury w mezoskali uzyskany metodą CM i DM [19]

zastosowano metodę CM (*continuous model of temperature field*) i DM (*discontinuous model of temperature field*) [19]. Czynną powierzchnię ściernicy utworzono z diamentowych rysików stosowanych w testach zarysowania (*scratch tests*) o maksymalnym wymiarze ziarna diamentowego 180 µm otoczonego powłoką wiążącą Cr-Cu. Można zauważyć, że model ciągły (CM), uwzględniający wszystkie ziarna ściernic, prowadzi do wyznaczenia mniejszego wydatku energetycznego niż model dyskretny (DM). Problemem jest ustalenie właściwych parametrów opisujących przepływ i wymianę ciepła w układzie porowaty materiał-ziarno ściernic. Można wyznaczyć odpowiednie mapy termiczne w skali mikro dla pojedynczego ziarna ściernego [19]. Podobną metodykę modelowania (opartą na równaniu przepływu cieczy Reynoldsa) zastosowano do oceny penetracji CCS do strefy styku wiór-ostrze [21].

Przedstawione kierunki rozwoju i zastosowania wieloskalowego modelowania oraz opracowanych na tej podstawie hybrydowych technik symulacji mikrostruktury materiału obrabianego i przebiegu procesu wydają się mieć przyszłościowy potencjał ze względu na ich praktycznie nieograniczone możliwości w doborze skali opisu zjawisk fizycznych – od atomowej do makroskali. Dodatkowo umożliwiają przeprowadzenie symulacji w akceptowalnym w badaniach i analizach inżynierskich czasie.

Więcej informacji odnośnie do przydatności modelowania wieloskalowego w obróbce plastycznej, addytywnej i hybrydowej można znaleźć m.in. w artykułach przeglądowych i monografiach [3, 17, 22].

LITERATURA

- [1] Lin K., Wang Z. "Multiscale mechanics and molecular dynamics simulations of the durability of fiber-reinforced polymer composites". *Communications Materials*. 4:66 (2023), <https://doi.org/10.1038/s43246-023-00391-2>, www.nature.com/commmat.
- [2] Gohari H., Hassan M., Shi B., Sadek A., Attia H., M'Saoubi R. "High-Performance Machining System: Process Optimization for a Cyber-Physical System – a Review". *preprint.org*, doi: 10.20944/preprints202401.1951.v1 (dostęp: styczeń 2024).
- [3] Yanagimoto J., Banabic D., Banu M., Madej L. "Simulation of metal forming. Visualization of invisible phenomena in the digital era". *CIRP Annals – Manufacturing Technology*. 71 (2022): 599–622, <https://doi.org/10.1016/j.cirp.2022.05.007>.
- [4] Grzesik W., Żak K., Tomkiewicz-Zawada A. „Analiza i modelowanie powierzchni wytwarzanych w obróbce ubytkowej”. Warszawa: PWN (2023).
- [5] Grzesik W. „Podstawy skrawania materiałów konstrukcyjnych”. Warszawa: PWN (2018).
- [6] Madej Ł., Sitko M. "Computationally Efficient Cellular Automata-Based Full-Field Models of Static Recrystallization: A Perspective Review". *Steel Review*. (2023): 1–14, <https://doi.org/10.1016/10.1002/srin.202200657>.
- [7] Shiaria B., Miller R.E., Klug D.D. "Multiscale simulation of material removal processes at the nanoscale". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 55 (2007): 2384–2405.
- [8] Cheng K., Huo D. "Micro-cutting. Fundamentals and applications". Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. (2013), <https://doi.org/10.1002/9781118536605>.
- [9] Melkote S., Liang S., Özel T., Jawahir I.S., Stephenson D.A., Wang B. "A Review of Advances in Modeling of Conventional Machining Processes: From Merchant to the Present". *Journal of Manufacturing Science and Engineering*. 144 (2022): 110801-11÷10801-22, <https://doi.org/10.1115/1.4053522>.
- [10] Ojal N., Copenhaver R., Cherukuri H.P., Schmitz T.L., Devlugt K.T., Jaycox A.W. "A realistic full-scale 3D modelling of turning using coupled smoothed particle hydrodynamics and finite element method for predicting cutting forces". *Journal of Manufacturing and Materials Processing*. 6, 33 (2022), <https://doi.org/10.3390/jmmp6020033>.
- [11] Hardt M., Jayaramaiah D., Bergs T. "On the application of the particle swarm optimization to the inverse determination of material model parameters for cutting simulations". *Modelling MDPI*. 2 (2021): 129–148, <https://doi.org/10.3390/modelling2010007>.
- [12] Jain V.K. "Micromanufacturing processes". Boca Raton: CRC Press (2013).
- [13] Xu Y., Liu H., Zhang L., Becton M. "Multiscale assessment of nanoscale manufacturing process on the freeform copper surface". *Materials MDPI*. 13 (2020): 3115, <https://doi.org/10.3390/ma13143135>.
- [14] Pratap A., Divise V., Goel S., Joshi S.S. "Understanding the surface generation mechanism during micro-scratching of Ti-6Al-4V". *Journal of Manufacturing Processes*. 82 (2022): 543–558, <https://doi.org/10.1016/j.mapro.2022.08.014>.
- [15] Xu Y., Liu H., Zhang L., Becton M. "Multiscale Assessment of Nanoscale Manufacturing Process on the Freeform Copper Surface". *Materials*. 13 (2020): 3135, <https://doi.org/10.3390/ma13143135>.
- [16] Eder S.J., Leroch S., Grützmacher P.G., Spenger T., Heckes H. "A multiscale simulation approach to grinding ferrous surfaces for process optimization". *International Journal of Mechanical Sciences*. 194 (2021): 106186, <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.106186>.
- [17] Teimouri R. "Multiscale Modeling of a Chain Comprising Selective Laser Melting and Post-Machining toward Nanoscale Surface Finish". *Materials*. 16 (2023) 7535, <https://doi.org/10.3390/ma16247535>.
- [18] "Multiscale Modeling". *Mechanics and Materials Laboratory*. <https://mm.ethz.ch/education/master-phd-studies/multiscale-modeling.html> (dostęp: styczeń 2024).
- [19] Wiesener F., Bergmann B., Wichmann M., Eden M., Freudenberg T., Schmidt A. "Modeling of heat transfer in tool grinding for multiscale simulations". *Procedia CIRP*. 117 (2023): 269–274, <https://doi.org/10.1016/j.procir.2023.03.046>.
- [20] Zhang N., Klippel H., Afrasiabi M., Röthlin M., Kuffa M., Bambach M., Wegener K. "Hybrid SPH – FEM solver for metal cutting simulations on the GPU including thermal contact modelling". *CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology*. 41 (2023): 311–327, <https://doi.org/10.1016/j.j.cirpj.2022.12.012>.
- [21] Sauer F., Codrignani A., Haber M., Falk K., Mayrhofer L., Chwiltzke C., Moseler M., Bauer H.-J., Schulze V. "Multiscale simulation approach to predict the penetration depth of oil between chip and tool during orthogonal cutting of AISI 4140". *Procedia CIRP*. 117 (2023): 426–431, <https://doi.org/10.1016/j.procir.2023.03.072>.
- [22] Zhang Y., Jung Y.-G., Zhang J. "Multiscale modelling of additively manufactured metals". Elsevier (2020). ■