

OPIS ZNISZCZENIA MIESZANEGO W WARUNKACH PEŁZANIA PRZY POMOCY AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH

Marcin CHRZANOWSKI*, Krzysztof NOWAK*

*Katedra Wytrzymałości Materiałów, Instytut Mechaniki Budowli, Wydział Inżynierii Lądowej, Politechnika Krakowska, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

mc@limba.wil.pk.edu.pl, kn@limba.wil.pk.edu.pl

Streszczenie: W pracy zaproponowano model opisu zniszczenia dla materiałów polikrystalicznych w warunkach pełzania. Przy pomocy automatu komórkowego zaimplementowano mieszany dyfuzyjno-odkształceniowy mechanizm rozwoju uszkodzeń. Przeprowadzone zostały symulacje dwuwymiarowe dla wybranej mikrostruktury materiału, dla różnych obciążeń zadawanych przez stałą prędkość odkształcenia. Przeanalizowano otrzymane obrazy struktur przy zniszczeniu, czasy do zniszczenia, a także prędkość rozwoju uszkodzenia. Wyniki zostały porównane ze znanymi modelami makro- i mikroskopowymi.

1. WPROWADZENIE

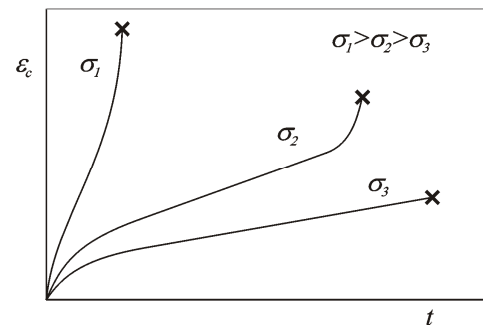
W warunkach pełzania, to jest w temperaturze pomiędzy 0.3 a 0.7 temperatury topnienia, metale i ich stopy ulegają zniszczeniu. Obserwacje makroskopowe wyróżniają dwa podstawowe typy zniszczenia: ciągłe i kruche. Na poziomie mikroskopowym zaobserwować można, że spowodowane ono jest przez pustki, które łączą się poprzez ziarna krystaliczne, albo wzdłuż granic tych ziaren. Zniszczenie ciągłe spowodowane jest przez pustki transkrystaliczne, a zniszczenie kruche przez międzykrystaliczne. Analiza mechanizmów, które doprowadziły do powstania i rozwoju tych pustek doprowadza do jeszcze jednego podziału: na pustki rosnące na skutek odkształcenia materii otaczającej pustki i na pustki rosnące na skutek dyfuzji wakansów. Pustki transkrystaliczne są kojarzone głównie z mechanizmem odkształceniowym, a pustki międzykrystaliczne z mechanizmem dyfuzyjnym.

Granica pomiędzy tymi rodzajami/mechanizmami zniszczenia nie jest ostra. Zaobserwować można przypadki, gdy ścieżka zniszczenia jest mieszana trans- i międzykrystaliczna. Nazywane są one zniszczeniem mieszanym. W obszarze tym oba mechanizmy wzrostu pustek są równoważne i dochodzi do sprzężenia między nimi. Opis tej strefy przejściowej dla przypadku jednoosiowego rozciągania przy pomocy modelu zbudowanego przy pomocy automatu komórkowego, opisującego zniszczenie na poziomie mikro, jest celem niniejszej pracy.

2. OPIS MAKROSKOPOWY

Na poziomie makroskopowym zniszczenie mieszane jest opisane jako stan przejściowy pomiędzy zniszczeniem ciągłym i kruchym. Zniszczenie ciągłe charakteryzuje się przede wszystkim dużą wartością odkształcenia przy zniszczeniu (rzędu kilkudziesięciu procent), charakterystyczne jest też duże przewężenie zniszczonego przekroju tak zwa-

na szyjka. Zniszczenie ciągłe powstaje przy niskich temperaturach (do 0.5 temperatury topnienia) i dużych prędkościach odkształcenia. Czas do zniszczenia w tym wypadku jest krótki.



Rys. 1. Przykładowy wygląd krzywych pełzania dla zniszczenia ciągłego (σ_1), mieszanego (σ_2) i kruchego (σ_3)

Zniszczenie kruche charakteryzuje się przede wszystkim małą wartością odkształcenia przy zniszczeniu (rzędu kilku procent). Warunki sprzyjające rozwojowi zniszczenia kruchego to podwyższona temperatura (pow. 0.5 temperatury topnienia) i mała prędkość wzrostu odkształcenia. Czas do zniszczenia w tym przypadku jest bardzo duży.

Ze zniszczeniem mieszanym mamy do czynienia, gdy opisane wielkości przyjmują wartości pośrednie. Przykładowy wygląd krzywej pełzania (zależność odkształcenia od czasu przy stałym obciążeniu dla jednoosiowego rozciągania) przedstawiono na Rys. 1.

2.1. Zniszczenie ciągłe

Opis zniszczenia ciągłego został przedstawiony przez Hoffa (1953). Założył on, że próbka jest rozciągana ze stałą siłą, a odkształcenie zmienia się zgodnie z prawem Nortona:

$$\dot{\epsilon}_c = B\sigma^n, \quad (1)$$

gdzie: B , n to stałe materiałowe, ε_c to odkształcenie pełzania, a σ naprężenie rzeczywiste. Czas do zniszczenia wyznaczył jako czas, w którym przekrój próbki zmaleje do zera, uwzględniając nieściśliwość materiału:

$$t_{fH} = \frac{1}{nB\sigma_0^n}, \quad (2)$$

gdzie: t_{fH} to czas do zniszczenia według Hoffa, σ_0 to naprężenie nominalne.

2.2. Zniszczenie kruche

Makroskopowy opis zniszczenia kruchego podał Kaczanow (1958). Wprowadził on parametr opisujący rozwój uszkodzenia i zaproponował prawo jego rozwoju:

$$\dot{\omega} = C \left(\frac{\sigma_0}{1-\omega} \right)^m, \quad (3)$$

gdzie C , m są stałymi materiałowymi, ω jest parametrem uszkodzenia. Parametr uszkodzenia przyjmuje wartości od 0, co oznacza brak uszkodzenia, do 1 oznaczające zniszczenie w danym punkcie materiałnym.

Czas do zniszczenia kruchego wyznaczyć można całkując równanie (3) dla ω od 0 do 1. Otrzymuje się wtedy zależność:

$$t_{fK} = \frac{1}{(m+1)C\sigma_0^m}. \quad (4)$$

2.3. Zniszczenie mieszane

Makroskopowy opis zniszczenia mieszanego można otrzymać poprzez zastąpienie w równaniu (3) naprężenia nominalnego przez naprężenie rzeczywiste. Uwzględniając zmniejszanie się przekroju, zgodnie z założeniami Hoffa, stała siła rozciągająca powoduje zwiększanie się naprężenia rzeczywistego. Otrzymany zatem czas do zniszczenia mieszanego jest mniejszy (w stosunku do zniszczenia kruchego Kaczanowa):

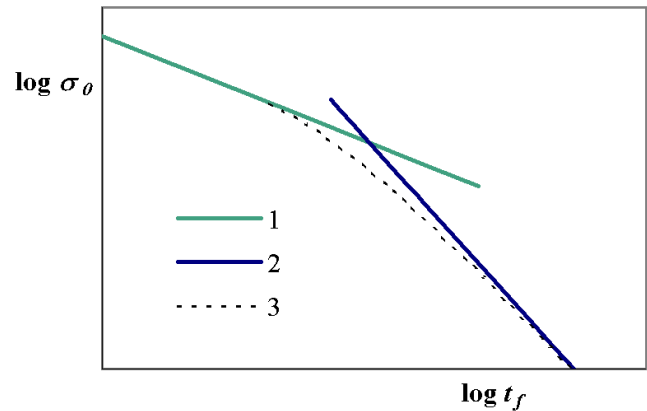
$$t_{fM} = \frac{1}{nB} \left(\frac{1}{\sigma^n} - \left(\frac{1}{\sigma^{n-m}} - \frac{(n-m)B}{(m+1)C} \right)^{\frac{n}{n-m}} \right). \quad (5)$$

Czas do zniszczenia mieszanego nie jest natomiast zawsze mniejszy niż czas wyznaczony z równania (2). Przekrój może szybciej osiągnąć zero niż parametr uszkodzenia. Dlatego można wyznaczyć naprężenie graniczne $\hat{\sigma}_0$, poniżej którego czas do zniszczenia jest zawsze czasem według Hoffa:

$$\hat{\sigma}_0 = \left(\frac{(m+1)C}{(n-m)B} \right)^{\frac{1}{n-m}}. \quad (6)$$

Naprężenie to wyznacza górną teoretyczną granicę zniszczenia mieszanego.

Czasy do zniszczenia w zależności od przyłożonego naprężenia nominalnego wyznaczone według równań (2), (4) i (5) zostały przedstawione na wykresie logarytmicznym na Rys. 2.



Rys. 2. Czasy do zniszczenia w zależności od przyłożonego naprężenia nominalnego dla zniszczenia ciągłego (1), kruchego (2) i mieszanego (3)

3. OPIS MIKROSKOPOWY

Opis makroskopowy pokazuje, że w obszarze przejściowym zachodzi zmiana w mechanizmie zniszczenia, jednak nie wyjaśnia przyczyny jej powstania. W tym celu konieczne jest zbadanie zjawisk zachodzących na poziomie struktury materiału.

Obserwacje mikroskopowe zachodzące przy zniszczeniu zostały zebrane w postaci tzw. map zniszczenia Ashby'ego (zob. Ashby, Gandhi i inni, 1979; Gandhi i Ashby, 1979; Fields, Weerasooriya i inni, 1980). Przedstawiony jest na nich rodzaj zniszczenia w zależności od przyłożonego naprężenia i temperatury. Odczytać z nich można, że zniszczenie ciągłe w warunkach pełzania dokonuje się głównie na skutek pęknięcia transkryystalicznego, natomiast zniszczenie kruche przy pełzaniu poprzez pęknięcie międzykryystaliczne. W interesującym nas obszarze przejściowym występują równocześnie oba rodzaje pęknięcia – ścieżka pęknięcia jest mieszana (zob. Rys. 3).

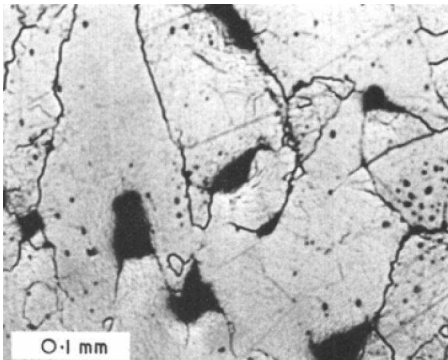
3.1. Mechanizmy wzrostu pustek

Za rozwój uszkodzeń w warunkach pełzania odpowiedzialne są głównie pustki rozwijające się na granicach lub wewnątrz ziaren.

Pustki rozwijające się na granicach tworzą się głównie na granicach prostopadłych do kierunku rozciągania i rosną na skutek ruchu dyfuzyjnego atomów z powierzchni pustki w kierunku granicy ziarna. Przy równoczesnej szybkiej dyfuzji powierzchniowej (po powierzchni pustki) formują równowagowy, soczewkowaty kształt. W dalszym etapie rozwoju pustki międzykryystaliczne łączą się ze sobą po powierzchni granicy ziaren doprowadzając do powstania szczelin. Wzrost dyfuzyjny pustek jest dominujący w warunkach podwyższonej temperatury i przy małej prędkości odkształcenia. Mechanizm ten odpowiada za kruche pęka-

nie międzykrystaliczne.

W warunkach sprzyjających zniszczeniu ciągliwemu wzrost pustek odbywa się na skutek odkształcenia materii otaczającej pustki. Mogą to być pustki utworzone na granicy ziaren, a także w ich wnętrzu. Pustki rosną w kształcie elipsoid wydłużonych w kierunku rozciągania. Odmienny jest mechanizm łączenia się (koalescencji) pustek. Jeżeli długość pustek jest porównywalna z odległością pomiędzy nimi mogą się one połączyć na skutek tzw. wewnętrznego szybkowania – zniszczenia mostków łączących pustki. Możliwe jest także połączenie przez ścięcie większej płaszczyny tzw. *voids sheeting*. Niektórzy dopuszczają także niezależny wzrost pustek, aż do ich bezpośredniego połączenia.



Rys. 3. Przykład zniszczenia mieszanego trans- i międzykrystalicznego dla żelaza obciążonego w kierunku pionowym w temperaturze 973 K naprężeniem 50 MPa (Fields, Weerasooriya i inni, 1980)

3.2. Modele wzrostu pustek

Podstawowy model dyfuzyjnego wzrostu pustek został opracowany przez Hulla i Rimmera (1959). Wykazali oni, że wzrost pustki jest proporcjonalny do strumienia atomów wzdłuż granicy ziarna, a ten z kolei zależy od przyłożonego naprężenia. Dodatkowo z bilansu energetycznego wynika, że poniżej naprężenia progowego $2\gamma/r$ (gdzie γ jest energią powierzchniową na granicy pustki, r promieniem pustki) pustka będzie maleć. Późniejsze udoskonalenia wzoru Hulla i Rimmera uwzględniające kształt pustek i inne efekty doprowadziły do następującego wzoru na dyfuzyjny wzrost promienia pustki (Riedel, 1987):

$$\dot{r} = \frac{\Omega \delta D_b \left(\sigma - \frac{2\gamma \sin(\psi)}{r} \right)}{2kTh(\psi)r^2q}, \quad (7)$$

gdzie Ω jest objętością atomową, δ grubością granicy, D_b współczynnikiem dyfuzji po granicach ziaren, ψ połową kąta przy wierzchołku pustki, k stałą Boltzmana, T temperaturą, $h(\psi)$ proporcją pomiędzy objętością pustki, a objętością kuli o tym samym promieniu, natomiast q jest parametrem zależnym od relacji promienia pustki do połowy odległości między pustkami:

$$q = \ln\left(\frac{\lambda}{2r}\right) + \left(\frac{2r}{\lambda}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{4}\left(\frac{2r}{\lambda}\right)^2\right) - \frac{3}{4}, \quad (8)$$

gdzie λ jest odległością między pustkami. Prędkość wzrostu promienia pustki dla mechanizmu dyfuzyjnego jest proporcjonalna do przyłożonego naprężenia σ . Jest ona odwrotnie proporcjonalna do kwadratu promienia, czyli dla małych pustek jest duża, natomiast dla dużych względnie mała.

Modele odkształceniowego wzrostu pustek oparte są na modelu wzrostu pustek plastycznych McClintocka (1968). W warunkach pełzania stosowany jest głównie model Hancocka (1976), opracowany oryginalnie dla liniowej lepkości dla pustki sferycznej:

$$\dot{r} = r\dot{\epsilon} - \frac{3\gamma}{2\sigma} \dot{\epsilon}. \quad (9)$$

W modelu tym względna zmiana promienia pustki jest proporcjonalna do prędkości odkształcenia, czyli zgodnie z prawem Nortona, do naprężenia do potęgi n . Podobnie jak dla pustek dyfuzyjnych występuje tu też naprężenie progowe, które wynosi $3\gamma/2r$.

W obszarze przejściowym występują równocześnie oba mechanizmy, dlatego wzrost pustek opisuje model sprzężony dyfuzyjno-odkształceniowy. Pierwszy taki model opisali Beere i Speight (1978). Założyli oni, że pustka rośnie dyfuzyjnie wewnątrz pola dyfuzyjnego, otoczonego z kolei przez pełzającą materię. Model ten został poprawiony przez Chena i Argona (1981), którzy w równaniu (8) zastąpili połowę odległości między pustkami $\lambda/2$ przez promień pustki i pola dyfuzyjnego $r+A$:

$$\dot{r} = \frac{\Lambda^3 \dot{\epsilon}}{2h(\psi)r^2q_s}, \quad (10)$$

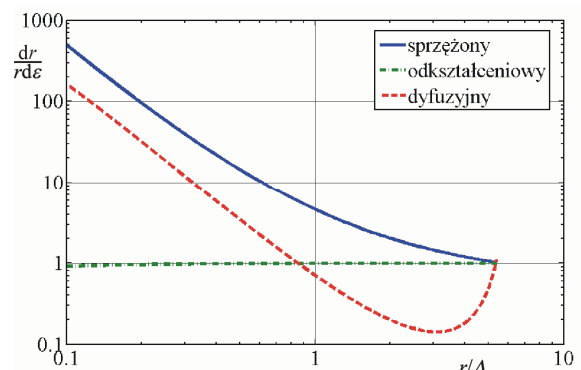
gdzie Λ oznacza rozmiar pola dyfuzyjnego, który wynosi:

$$\Lambda = \left(\frac{\Omega \delta D_b \sigma}{kT \dot{\epsilon}} \right)^{1/3}, \quad (11)$$

natomiast parametr q_s wynosi:

$$q_s = \ln\left(\frac{r+A}{r}\right) + \left(\frac{r}{r+A}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{4}\left(\frac{r}{r+A}\right)^2\right) - \frac{3}{4}. \quad (12)$$

W powyższych wzorach założono, że naprężenie progowe jest pomijalnie małe.



Rys. 4. Zależność względnej prędkości wzrostu pustki od względnego promienia dla modeli dyfuzyjnego, odkształceniowego i sprzężonego

Wzrost pustek według modelu sprzężonego dla małych pustek jest podobny do wzrostu według modelu dyfuzyjnego. Natomiast dla dużych pustek model sprzężony zachowuje się podobnie jak model odkształceniowy. Dla wartości pośrednich ($r \approx 1$) w modelu sprzężonym oba mechanizmy dodają się i wzrost jest szybszy niż byłby dla każdego z nich z osobna. Zostało to pokazane na wykresie na Rys. 4, gdzie porównano względną prędkość wzrostu promienia wyliczoną według równań (7), (9) i (10) dla miedzi w temperaturze 673K i naprężeniu 50 MPa. Odległość między pustkami przyjęto 10 μm , pozostałe dane materiałowe przyjęto według Riedla (1987) oraz Felthama i Meakina (1959).

3.3. Czas do zniszczenia

Wyznaczenie czasu do zniszczenia na podstawie modeli wzrostu pustek nie jest prostym zadaniem. Najprostsze podejście polega na scałkowaniu równania wzrostu promienia pustki od promienia pustki minimalnej do koalescencji z sąsiednimi pustkami, czyli do połowy odległości między nimi. Podejście to ma szereg wad. Pomija się czas nukleacji pustek, a także czas od koalescencji pustek do zniszczenia przekroju.

Badania doświadczalne pokazują, że nukleacja pustek zachodzi w sposób ciągły podczas odkształcania próbki, a jej prędkość jest proporcjonalna do prędkości odkształcenia (Dyson, 1983). Wyznaczenie czasu do zniszczenia tylko na podstawie równania wzrostu pustek dyfuzyjnych ($\sim \sigma$) dawałoby czas do zniszczenia odwrotnie proporcjonalny do przyłożonego naprężenia ($\sim \sigma^{-1}$). Połączenie wzrostu pustek z ciągłą nukleacją powoduje, że czas do zniszczenia $t_f \sim \sigma^{-m}$, gdzie $1 < m < n$. Dla pustek rosnących w sposób odkształceniowy, gdzie zarówno nukleacja i wzrost jest proporcjonalny do odkształcenia, czas do zniszczenia jest odwrotnie proporcjonalny do prędkości odkształcenia $t_f \sim \sigma^{-n}$.

Dużo trudniejszy do oszacowania jest wpływ na czas do zniszczenia ostatniego etapu rozwoju uszkodzenia, szczególnie dla pustek międzykrystalicznych. Dla pustek transkrystalicznych można z dobrą dokładnością założyć, że czas do koalescencji jest czasem do zniszczenia. W przypadku pustek międzykrystalicznych istotną rolę zaczyna odgrywać wielkość ziarna. Nie wszystkie ścianki ziaren kawitują w tym samym czasie i zniszczenie pojedynczej ścianki nie jest równoznaczne ze zniszczeniem przekroju. Czas propagacji uszkodzenia z jednej ścianki na drugą może być dużo większy, niż czas do zniszczenia pojedynczej ścianki, czy czas do koalescencji pustek.

W przypadku zniszczenia mieszanego pustki rosną głównie poprzez mechanizm sprzężony odkształceniowo-dyfuzyjny, natomiast ich koalescencja odbywa się głównie poprzez szczeliny międzykrystaliczne (por. Rys. 3), dlatego oszacowanie czasu do zniszczenia napotyka podobne trudności jak w przypadku zniszczenia międzykrystalicznego.

4. ZASTOSOWANIE AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH

Analiza wyników uzyskanych przy pomocy wyników mikromechanicznych i porównanie ich z modelami empi-

rycznymi wykazuje, że dla poprawnego oszacowania czasu do zniszczenia mniej istotna jest dokładność modelu wybranego fragmentu procesu (np. wzrostu pustek), a ważniejsza jest poprawna korelacja pomiędzy różnymi mechanizmami i ich oddziaływanie ze strukturą materiału. Dlatego w ostatnich latach rozwijają się metody, które w sposób niestandardowy opisują zjawiska zachodzące w mikrostrukturze materiału (metody probabilistyczne, dynamiki molekularnej, automaty komórkowe, zob. Delph, 2002), a także wiążą ze sobą zjawiska zachodzące na różnych poziomach (modele wieloskalowe).

Spośród tych metod szczególnie wygodne są automaty komórkowe. Należą one do metod dyskretnych, gdzie przy pomocy wartości dyskretnych opisana jest przestrzeń, czas, a także zmienne stanu. Cechą charakterystyczną automatów komórkowych jest możliwość opisu złożonych zjawisk poprzez zastosowanie prostej reguły zmiany stanu w złożonej strukturze (zob. Wolfram, 2002). Zmiana stanu komórki jest opisana jako funkcja zależna od stanów tej samej komórki i jej otoczenia w chwili poprzedniej. Jeżeli funkcja ta jest funkcją losową automat jest automatem probabilistycznym.

Automaty komórkowe są z powodzeniem stosowane do opisu różnych zjawisk związanych z mikrostrukturą materiału, głównie rekrytalizacji (Raabe, 2002), ale także do opisu zniszczenia (Matic i Geltmacher, 2001; Shterenliht i Howard, 2006).

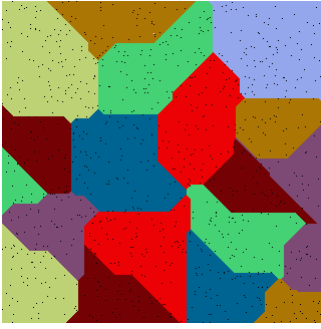
4.1. Model struktury materiału

Model struktury materiału został oparty na koncepcji reprezentatywnego elementu objętościowego (RVE ang. *Representative Volume Element*).

Zaimplementowano dwuwymiarowy automat komórkowy z sąsiedztwem Moore'a. Zmienne stanu przyjmują wartości od -1 do G , gdzie G jest dodatnią liczbą całkowitą oznaczającą maksymalny numer ziarna. Dodatni stan komórki oznacza komórkę reprezentującą element masy, a numer oznacza przynależność do konkretnego ziarna. Stan równy 0 oznacza pustkę, natomiast stan -1 służy do określenia komórek poza RVE.

Do zamodelowania polikrystalicznej struktury materiału wykorzystana została dyskretna teselacja Voronoia (Adamatzky, 1996). W stanie początkowym wewnątrz RVE, będące kwadratem o rozmiarach $N_0 \times N_0$ zostaje wypełnione komórkami o stanie 0, a zewnątrz komórkami o stanie -1. Następnie losowanych jest n_{seed} punktów zarodkowych o losowych numerach z przedziału $\langle 1, G \rangle$, wokół których następnie rosną ziarna, aż do wypełnienia całego wnętrza RVE. Powstaje w ten sposób homogeniczna struktura ziaren odpowiadająca schematowi wysycenia miejsc zarodkowania (por. Gawąd, 2007). Ostatni krok generacji struktury polega na wylosowaniu $f_{v0} \times N_0 \times N_0$ pustych komórek, gdzie f_{v0} jest początkową gęstością pustek.

Przykładowa struktura początkowa dla $N_0=321$, $n_{seed}=20$, $f_{v0}=0.01$ została pokazana na Rys. 5.



Rys. 5. Przykładowa struktura początkowa dla $N_0=321$, $n_{seed}=20$, $f_{v0}=0.01$ (komórki puste oznaczone są na czarno)

4.2. Model procesu rozwoju uszkodzeń

Na wzór mechanizmu wzrostu pustek, który łączy wpływ odkształcenia i dyfuzji wakansów, zbudowany jest algorytm rozwoju uszkodzenia przy pomocy automatu komórkowego. Złożony on jest z dwóch podstawowych kroków odkształcenia i dyfuzji. Podstawową wielkością, która steruje przebiegiem procesu jest gęstość pustek f_v . Została ona zadana jako potęgowa funkcja odkształcenia, której parametry są wyznaczone doświadczalnie na podstawie pomiarów gęstości masy podczas próby pełzania (Belloni, Bernasconi i inni, 1977):

$$\rho = \rho_0(1 - H\varepsilon^\gamma), \quad (13)$$

gdzie ρ , ρ_0 są gęstością masy i gęstością początkową, ε to odkształcenie, natomiast H i γ to parametry materiałowe.

W kroku odkształcenia zmieniane są wymiary RVE. Wymiar w kierunku rozciągania jest zadana funkcją odkształcenia, natomiast drugi wymiar jest wyliczany, tak aby zachować stałą objętość elementu. W kroku odkształcenia wyliczana jest liczba pustych komórek, która powinna pozostać na koniec iteracji, zgodnie ze wzorem:

$$E(t_i) = f_{v0}V_0 + (1 - f_{v0})V_0H\varepsilon(t_i)^\gamma, \quad (14)$$

gdzie $E(t_i)$ jest ilością pustych komórek w chwili t_i , $V_0=N_0 \times N_0$ jest objętością początkową RVE.

Sam krok odkształcenia został oparty na algorytmie zaproponowanym przez Matica i Geltmachera (2001). Polega on na równomiernym rozciągnięciu struktury RVE (w celu uniknięcia korelacji pomiędzy komórkami, ta równomierność jest w sposób losowy zaburzona), a następnie rzutowaniu tej rozciągniętej struktury na siatkę komórek automatu. Podczas rzutowania wyznaczana jest chwilowa wartość masy komórki $m(x, t_{i+1})$, która jest liczbą rzeczywistą z przedziału $\langle 0, 1 \rangle$, a następnie masa ta jest porównywana z wartością progową m_{th} . Jeżeli masa chwilowa jest większa od wartości progowej, stan komórki w kroku t_{i+1} przyjmuje wartość odpowiadającą temu ziarnu, którego udział procentowy w masie chwilowej jest największy. Jeżeli wartość masy chwilowej jest mniejsza lub równa wartości progowej, stan komórki przyjmuje wartość 0. Wartość progowa wyznaczana jest w taki sposób, by ilość komórek pustych po tym kroku przyjęła określoną wartość:

$$E^1(t_{i+1}) = E(t_i) + \alpha_{new}(E(t_{i+1}) - E(t_i)), \quad (15)$$

gdzie α_{new} jest parametrem metody wyznaczającym proporcję, ile nowych pustych komórek ma powstać w kroku odkształcenia w stosunku do wszystkich nowo powstałych pustych komórek. W algorytmie tym, w przeciwieństwie do modelu zniszczenia kruchego (zob. Chrzanowski i Nowak, 2007), wytrzymałość granicy podczas odkształcenia jest porównywalna z wytrzymałością wnętrza ziarna.

Liczba pustych komórek jest następnie uzupełniana poprzez losowe wyznaczenie pustych komórek w całej objętości RVE.

Krok dyfuzji polega na swobodnym ruchu pustych komórek i ich agregacji w pustki i szczeliny. Ruch pustej komórki oparty został na koncepcji sąsiedztwa blokowego Margolusa (1984), która pozwala budować automat zachowujący stałą liczbę komórek o danej właściwości. Cała powierzchnia automatu dzielona jest na bloki o wymiarach 2×2 . Położenie pustych komórek może się zmienić wewnątrz bloku, przy czym zachowywana jest ich liczba. W następnej iteracji położenie bloków jest przesuwane o jedną komórkę w losowym kierunku. Mechanizm agregacji pustek został wprowadzony przy pomocy kryterium energetycznego. Nowe położenie pustych komórek zostaje zachowane (w ramach bloku) tylko wtedy, gdy wartość energii powierzchniowej jest taka sama lub mniejsza jak w pozycji wyjściowej:

$$J = w_{e-m}l_{e-m} + w_{g-g}l_{g-g}, \quad (16)$$

gdzie J jest miarą energii, l_{e-m} , l_{g-g} są to długości granic pomiędzy pustką i masą oraz pomiędzy dwoma sąsiednimi ziarnami, natomiast w_{e-m} , w_{g-g} to współczynniki wagowe dla tych rodzajów granic. Aby zwiększyć stabilność metody długości granic liczone są w bloku powiększonym o jedną komórkę (czyli w bloku 4×4). W niniejszej pracy przyjęto $w_{e-m}=1$, $w_{g-g}=0$, tak by pustki dyfuzyjne rozwijały się wzdłuż granicy ziaren.

4.3. Skala czasowa

W zaproponowanym modelu występują dwa mechanizmy bezpośrednio związane z czasem. Są to odkształcenie i dyfuzja. Rozmiar automatu w komórkach ogranicza możliwość zadawania deformacji. Rozmiary liniowe RVE w jednej iteracji mogą się zmienić o co najmniej 2 komórki. Aby więc zmniejszyć prędkość odkształcenia krok odkształcenia wykonywany jest nie w każdej iteracji. Parametr T_{def} określa, co którą iterację wykonywany jest krok odkształcenia. Dlatego początkowa prędkość odkształcenia wynosi:

$$\dot{\varepsilon}_0 = \frac{2}{N_0 T_{def} \Delta t} \quad (17)$$

gdzie Δt jest długością kroku czasowego automatu. Ponieważ $2 \ll N_0$ prędkość tę można uznać za stałą w trakcie całego procesu.

Krok dyfuzji wykonywany jest w każdej iteracji automatu.

4.4. Miara uszkodzenia i stan zniszczenia

W każdej iteracji automatu wyznaczana jest wartość parametru uszkodzenia ω . Liczony jest rozmiar liniowy każdej pustki (czyli klastra połączonych pustych komórek) i następnie jest on dzielony przez bieżący rozmiar RVE w danym kierunku. Największa z tak otrzymanych wartości przyjmowana jest za wartość parametru uszkodzenia w danej chwili. Gdy wartość parametru uszkodzenia osiągnie 1, stan ten uznawany jest za zniszczenie elementu. Największa pustka łączy wtedy przeciwległe krawędzie RVE.

Zdefiniowana w ten sposób miara uszkodzenia jest proporcjonalna do promienia największej pustki i może być użyta do porównania z modelami mikromechanicznymi rozwoju pustek.

5. WYNIKI SYMULACJI

Przy pomocy automatu komórkowego opisanego w rozdz. 4. została przebadana struktura przedstawiona na Rys. 5. Poprzez zmianę parametru T_{def} w zakresie od 1 do 100 iteracji uzyskano obciążenie elementu w przybliżeniu stałą prędkością odkształcenia od $6.2E-3$ do $6.2E-5$ (iteracja⁻¹). Pozostałe użyte parametry wynosiły $H=1.17$, $\gamma=2.3$ (zgodnie z wynikami dla miedzi, uzyskanymi przez Belloniego, Bernasconiego i inni, 1977), $\alpha_{new}=0.25$.

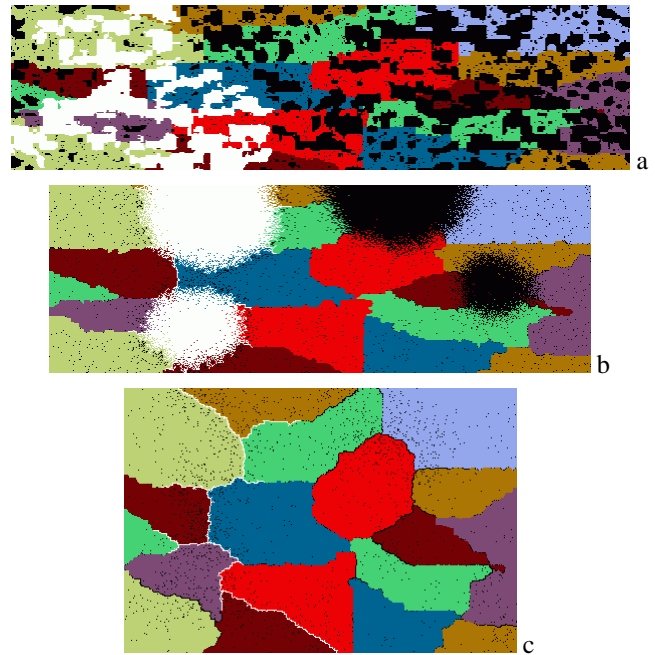
5.1. Obrazy struktury po zniszczeniu

Struktury końcowe otrzymane w wyniku symulacji przedstawiono na Rys. 6.

Dla dużej prędkości odkształcenia (Rys. 6a) wpływ dyfuzji jest pomijalny. Pustki rosną wyłącznie na skutek mechanizmu odkształceniowego. Kształt pustek jest wydłużony w kierunku rozciągania. Jest on zbliżony do prostokąta, gdyż kwadratowa siatka automatu preferuje ten kształt. Widoczny jest brak mechanizmu koalescencji pustek, które łączą się wyłącznie na skutek bezpośredniego połączenia. W wyniku tego odkształcenie przy zniszczeniu jest stosunkowo duże.

Przy zmniejszaniu prędkości odkształcenia, wpływ dyfuzji staje się coraz większy. Dyfuzja powoduje, że większe pustki rosną kosztem mniejszych, a kształt pustek jest bardziej kulisty (zob. Rys. 6b). Pustki takie mogą połączyć się przez bezpośrednie zetknięcie, albo poprzez szczelinę międzykryształiczną (jak na Rys. 6b). W wyniku tego powstaje zniszczenie o charakterze mieszanym.

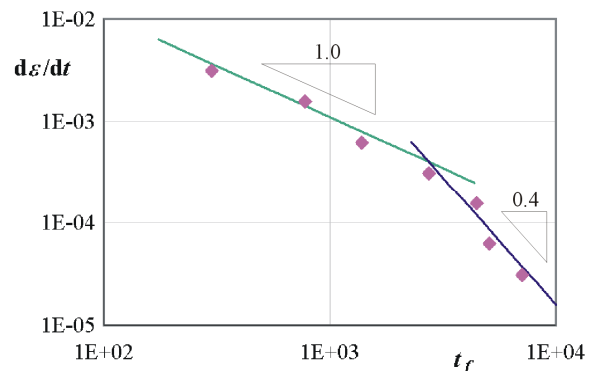
Dalsze zmniejszanie prędkości odkształcenia powoduje, że bezpośredni wpływ odkształcenia na mechanizm zniszczenia maleje. Uszkodzenia rozwijają się wyłącznie na granicach ziaren, zgodnie z założonym dążeniem do minimalizacji energii określonej równaniem (16). Ścieżka zniszczenia ma charakter wyłącznie międzykryształiczny. Istnieje natomiast pośredni wpływ odkształcenia poprzez równanie (14). Wielkość odkształcenia przy zniszczeniu można oszacować wstawiając do równania (14) liczbę pustek konieczną do otrzymania ścieżki łączącej krawędzie elementu.



Rys. 6. Obraz stanów końcowych dla zniszczenia ciągłego (a) $T_{def}=1$, $d\epsilon/dt=6.2E-3$, $\epsilon_f=66\%$; mieszanego (b) $T_{def}=20$, $d\epsilon/dt=3.1E-4$, $\epsilon_f=53\%$; kruchego (c) $T_{def}=100$, $d\epsilon/dt=6.2E-5$, $\epsilon_f=20\%$ (na biało zaznaczone są puste komórki tworzące szczelinę łączącą krawędzie RVE, na czarno pozostałe puste komórki)

5.2. Czas do zniszczenia

Otrzymane czasy do zniszczenia w zależności od prędkości odkształcenia zostały przedstawione na wykresie logarytmicznym na Rys. 7. Punkty uzyskane w wyniku symulacji układają się wzdłuż dwóch linii prostych. Zniszczeniu wywołanemu mechanizmem odkształceniowym odpowiada prosta o współczynniku kierunkowym 1, natomiast dla mechanizmu dyfuzyjnego 0.4. Ta ostatnia wielkość jest stosunkowo mała w porównaniu z współczynnikami otrzymywanymi doświadczalnie (por. Evans, 1984). Wynika to z przyjętego stosunkowo dużego uszkodzenia początkowego 0.01, które zwiększa kruchość, a tym samym i nachylenie odpowiedniej prostej na wykresie czasu do zniszczenia.

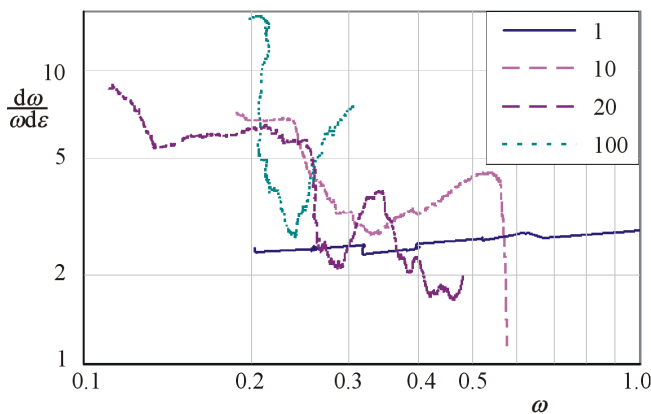


Rys. 7. Czasy do zniszczenia (w iteracjach) otrzymane dla różnych prędkości odkształcenia dla struktury z Rys. 5

W przeciwieństwie do modelu makroskopowego (równanie 5) nie jest widoczna strefa przejściowa pomiędzy zniszczeniem transkrystalicznym i międzykrystalicznym. Zmiana mechanizmu odbywa się w sposób skokowy, pomimo, że mechanizm mieszany jest widoczny na obrazie stanów końcowych.

5.3. Prędkość wzrostu uszkodzenia

Dokładne zrozumienie zamodelowanego mechanizmu rozwoju uszkodzenia daje wykres zmian względnej prędkości parametru uszkodzenia ($d\omega/d\varepsilon/\omega$) w zależności od wartości parametru uszkodzenia (Rys. 8). Jest on pewną analogią do teoretycznego wykresu zmian względnej prędkości wzrostu promienia pustki (Rys. 4). Na Rys. 8 przedstawione zostały wyniki odnoszące się do czterech wybranych przebiegów, które zostały wcześniej uśrednione, aby odfiltrować duże lokalne skoki wartości parametru uszkodzenia. Tam, gdzie to było możliwe usunięto część wykresu odpowiadającą koalescencji pustek, choć ustalenie granicy pomiędzy wzrostem pojedynczej pustki a koalescencją z sąsiednimi pustkami nie jest nigdy precyzyjne.



Rys. 8. Względna prędkość wzrostu parametru uszkodzenia w zależności od wielkości parametru uszkodzenia dla różnych prędkości odkształcenia ($T_{def}=1, 10, 20$ i 100)

Dla wzrostu odkształceniowego ($T_{def}=1$) otrzymano prawie poziomą linię, podobnie jak dla modelu teoretycznego (Rys. 4). Prędkość wzrostu jest jednak dwa razy większa od teoretycznej. Wynikać to może z nałożenia się efektu koalescencji pustek, gdyż dla tego przypadku nie ma widocznej granicy pomiędzy wzrostem a koalescencją.

Dla przebiegów o charakterze mieszanym ($T_{def}=10$ i 20) widoczne są obszary wzrostu dyfuzyjnego, charakteryzujące się dużym spadkiem względnej prędkości, a także obszary wzrostu odkształceniowego o przebiegu poziomym lub lekko wznoszącym się. Duże wzrosty prędkości wynikają z łączenia się sąsiednich pustek. Mechanizm mieszany, rozważany w niniejszej pracy, prowadzi więc do innych wyników niż otrzymywane na podstawie modelu sprzężonego dyfuzyjno-odkształceniowego wzrostu pustek. Wpływ obu mechanizmów nie sumuje się, a następują skokowe zmiany pomiędzy jednym mechanizmem a drugim.

6. WNIOSKI

Zaproponowany model mieszanego dyfuzyjno-odkształceniowego rozwoju uszkodzenia zbudowany przy użyciu automatu komórkowego został porównany z modelami makro- i mikroskopowymi. Otrzymane obrazy stanów zniszczenia odpowiadają obrazom otrzymywanym doświadczalnie. Widoczna jest jednak różnica we współdziałaniu obu mechanizmów, które nie zachodzi na zasadzie sprzężenia, lecz równoległego rozwijania się obu mechanizmów i przeskoków pomiędzy jednym a drugim. Ponieważ doświadczenia potwierdzają zarówno istnienie mechanizmu sprzężonego jak i równoległego wzrostu, potrzebne są dokładniejsze badania, który mechanizm, w jakich warunkach jest dominujący.

LITERATURA

1. **Adamatzky A. I.** (1996), Voronoi-Like Partition of Lattice in Cellular Automata, *Math. Comput. Modelling*, Vol. 23, No. 4, 51-66.
2. **Ashby M. F., Gandhi C., Taplin D.M.R.** (1979), Fracture-Mechanism Maps and Their Construction for F.C.C. Metals and Alloys, *Acta Metall.*, Vol. 27, No. 5, 699-729.
3. **Beere W., Speight M.V.** (1978), Creep cavitation by vacancy diffusion in plastically deforming solid, *Met. Sci.*, Vol. 12, No. 4, 172-176.
4. **Belloni G., Bernasconi G. Piatti G.** (1977), Creep damage and rupture in AISI 310 austenitic steel, *Meccanica*, Vol. 12, No. 2, 84-96.
5. **Chen I.W., Argon A.S.** (1981), Diffusive growth of grain-boundary cavities, *Acta Metall.*, Vol. 29, No. 10, 1759-1768.
6. **Chrzanowski M., Nowak K.** (2007), Cellular Automata in Damage Mechanics: Brittle Creep Rupture Case, *Arch. Mech.*, Vol. 59, No. 4-5, 329-339.
7. **Delph T.J.** (2002), Some Selected Topics in Creep Cavitation, *Metall. and Materials Trans. A*, Vol. 33A, No. 2, 383-390.
8. **Dyson B.F.** (1983), Continuous cavity nucleation and creep fracture, *Scr. Metall.*, Vol. 17, No. 1, 31-37.
9. **Evans H.E.** (1984), *Mechanisms of Creep Fracture*, Elsevier Applied Science Publishers, London New York
10. **Feltham P., Meakin J.D.** (1959), Creep in Face-Centred Cubic Metals with Special Reference to Copper, *Acta Metall.*, Vol. 7, No. 9, 614-627.
11. **Fields R.J., Weerasooriya T., Ashby M. F.** (1980), Fracture Mechanisms in Pure Iron, Two Austenitic Steels and One Ferritic Steel, *Metallurgical Transactions A*, Vol. 11A, No. 2, 333-347.
12. **Gandhi C., Ashby M. F.** (1979), Fracture-mechanism maps for materials which cleave - F.C.C., B.C.C. and H.C.P. metals and ceramics, *Acta Metall.*, Vol. 27, No. 10, 1565-1602.
13. **Gawąd J.** (2007), *Modelowanie wieloskalowe metodą automatów komórkowych własności materiałów odkształczanych plastycznie*, praca doktorska, AGH, Kraków.
14. **Hancock J.W.** (1976), Creep cavitation without a vacancy flux, *Met. Sci.*, Vol. 10, No. 9, 319-325.
15. **Hoff N.J.** (1953), The Necking and the Rupture of Rods Subjected to Constant Tensile Loads, *J. Appl. Mech.*, Vol. 20, No. 1, 105-108.
16. **Hull D., Rimmer D.E.** (1959), The growth of grain-boundary voids under stress, *Philosophical Magazine*, Vol. 4, No. 42, 673-687.
17. **Kachanov L.M.** (1958), O wremieni rozruschenia w uslo-wiach polzutchectwi, *Izv. Akad. Nauk. SSR*, No. 8, 26-31.

18. **Margolus N.H.** (1984), Physics-like models of computation, *Physica D*, Vol. 10, No. 1-2, 81-95.
19. **Matic P., Geltmacher A.B.** (2001), A cellular automaton-based technique for modeling mesoscale damage evolution, *Comp. Mat. Sci.*, Vol. 20, No. 1, 120-141.
20. **McClintock F.A.** (1968), A criterion for ductile fracture by the growth of holes, *J. Appl. Mech.*, Vol. 35, No. 2, 363-371.
21. **Raabe D.** (2002), Cellular Automata in Materials Science with Particular Reference to Recrystallization Simulation, *Ann. Review of Materials Research*, Vol. 32, No. 1, 53-76.
22. **Riedel H.** (1987), *Fracture at High Temperatures*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo.
23. **Shterenlikht A., Howard I.C.** (2006), The CAFE model of fracture - application to a TMCR steel, *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, Vol. 29, No. 9-10, 770-787.
24. **Wolfram S.** (2002), *A New Kind of Science*, Wolfram Media, Inc, Champaign.

DESCRIPTION OF MIX-MODE CREEP FAILURE USING CELLULAR AUTOMATA

Abstract: The model of creep failure for polycrystalline materials in creep condition is proposed. The diffusional and creep-deformation damage growth mechanisms are implemented using cellular automaton. The two-dimensional simulations are performed for chosen microstructure of material for constant strain rate loading. The material structures at failure, times to failure and damage development rate are analysed. The results are compared with macro- and micro-mechanical models.